

EXEMPLE D'APPLICATION PROSIM DAC

PROCEDE VTSA ADSORPTION DE DICHLOROMETHANE SUR CHARBON ACTIF

INTERET DE L'EXEMPLE

Cet exemple traite d'un procédé VTSA (Vacuum Thermal Swing Adsorption) dans lequel du dichlorométhane est adsorbé sur un charbon actif. La régénération du charbon actif est faite en deux étapes :

1. Thermiquement par un courant d'azote chaud,
2. Sous vide par un courant d'azote à basse pression.

Ce procédé est modélisé dans ProSim DAC, le logiciel de simulation dynamique de ProSim dédié aux colonnes d'adsorption gaz-solide.

DIFFUSION	☒ Libre Internet	☐ Réservée clients	☐ Restreinte	☐ Confidentielle
-----------	--	---	-------------------------------------	---

FICHIER PROSIMPLUS CORRESPONDANT	<i>PSPDYN_EX_FR-COV-VTSA.pmp3</i>
----------------------------------	-----------------------------------

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

1. MODELISATION DU PROCEDE 3

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 simulation5

1.5.3. Colonne d'adsorption5

2. RESULTATS 20

2.1. Rapport de simulation de la colonne d'adsorption 20

2.2. Profils de la colonne d'adsorption 21

2.3. Profils du courant de sortie 22

3. BIBLIOGRAPHIE 24

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 en deux étapes (procédé VTSA) :

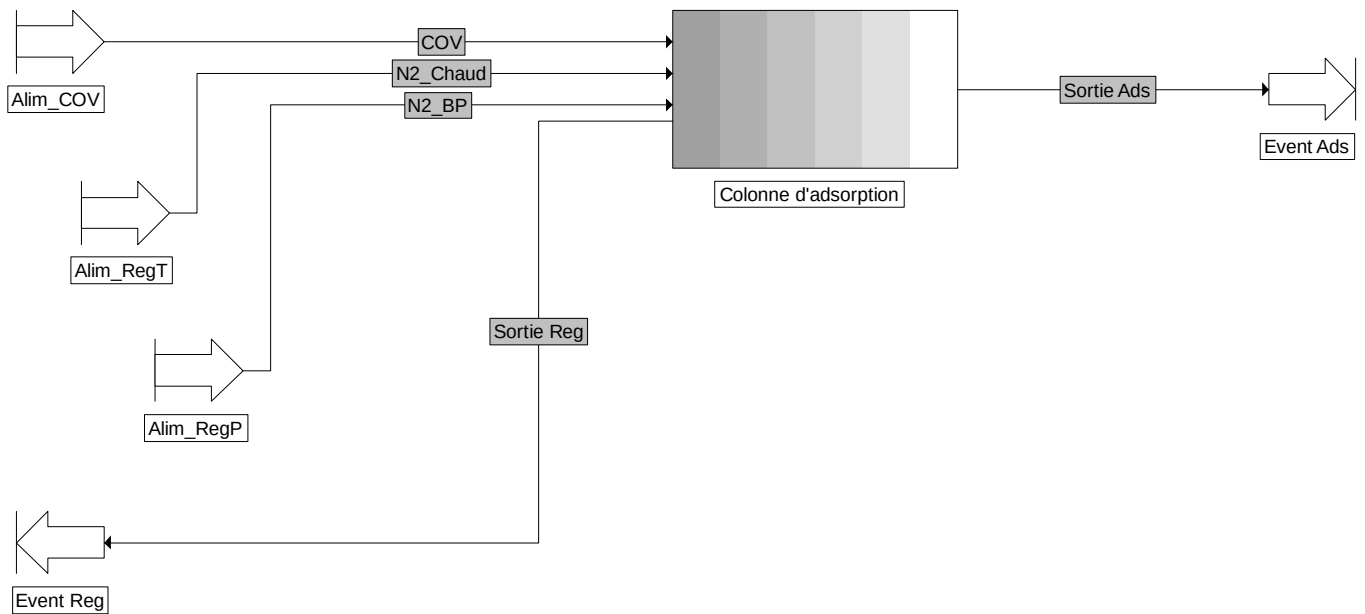
1. Thermiquement par un flux chaud d'azote pur,
2. Sous vide par un flux d'azote à basse pression.

Trois flux d'alimentation sont utilisés dans cet exemple : les courants « COV », « N2_Chaut » et « N2_BP ». 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 en température, seul le flux « N2_Chaut » est utilisé. Ce courant composé d'azote pur chaud sert à régénérer le lit d'adsorbant. Le flux d'azote pur à basse pression « N2_BP » n'est employé quant à lui que lors de l'étape de régénération en pression. 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[®] ¹ 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 ₂ Cl ₂	75-09-2
Azote	N ₂	7727-37-9

1.4. Modèle thermodynamique

L'adsorption et la régénération sont faites dans des conditions proches de la pression atmosphérique (pression maximale de l'ordre de 1.5 atm) et à des températures inférieures à 100°C. Le profil thermodynamique « Idéal » est ainsi sélectionné dans le calculator Simulis Thermodynamics.

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

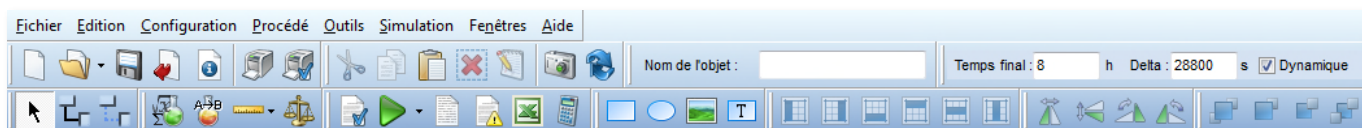
1.5. Paramètres opératoires

1.5.1. Alimentations du procédé

	Courant de COV	Courant d'azote chaud	Courant d'azote à basse pression
Température (°C)	24	95	24
Pression (atm)	1	1	0,04
Débit total (kmol/h)	0,08399	0,022308	0,002612
Fractions molaires			
Dichlorométhane	0,0141	0	0
Azote	0,9859	1	1

1.5.2. Durée de simulation

Le « Temps final » est la durée opératoire réelle de l'opération (adsorption + régénération en température + régénération en pression 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	8 h
Delta	28 800 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 trois premières alimentations servent dans cet exemple comme le montre la copie d'écran ci-dessous.

Identification Paramètres Scripts Rapport Courants Profils Notes Paramètres

Alimentations Caractéristiques Constituants Transfert Autres Adsorption / Régénération

Flux

- ☒ Flux d'adsorbats COV ← Courant de dichlorométhane
- ☒ Flux pour la régénération en température N2_Chaud ← Courant d'azote chaud
- ☒ Flux pour la régénération en pression N2_BP ← Courant d'azote à basse pression
- ☐ Flux pour le refroidissement

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

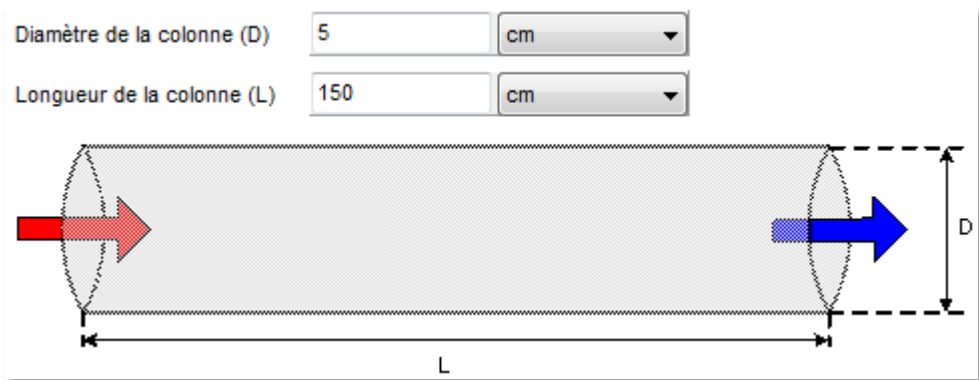
Le flux sortant durant l'étape d'adsorption correspond à la sortie « Sortie Ads » et le flux sortant durant l'étape de régénération correspondant à la sortie « Sortie Reg », comme le montre la copie d'écran ci-dessous :

Sorties

- ☒ Etapes d'adsorption Sortie Ads
- ☒ Etapes de régénération Sortie Reg

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	90°C

1.5.3.5. Caractéristiques du lit d'adsorbant

Caractéristiques du lit	
Degré de vide	0,3556

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	550 kg/m ³
Chaleur spécifique	1050 J/kg/K
Ratio Surface/Volume	1500 m ² /m ³

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 à 295 K et 1 atm.

Conditions des mesures	Valeur
Conditions	Utilisateur
Température	295K
Pression	1 atm

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 est chargée avec un flux de gaz identique à l'alimentation en COV. ProSim DAC va alors calculer automatiquement les quantités adsorbées à l'instant initial.

Initialisation	Valeur
Type	Fournie par l'utilisateur
Pression	1 atm
Température	15°C
Factions molaires	
Dichlorométhane	0,0141
Azote	0,9859

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 ».

IdentificationParamètresScriptsRapportCourantsProfilsNotesParamètres avancés

AlimentationsCaractéristiquesConstituantsTransfertAutresAdsorption / RégénérationBilan financierImpressionsParamètres

Colonne

Type de colonneColonne à flux longitudinal

Editer...

Transfert thermiqueQ donnée et transfert à la paroi

Température de la paroi90°C

AdsorbantCharger...

Degré de vide du lit0,3556 m³/m³

Diamètre des particules4 mm

Densité des particules550 kg/m3

Chaleur spécifique du solide1050 J/kg/K

Rapport surface/volume1500 m²/m³

Conditions (T,P) des mesures

ConditionsUtilisateur

Température295 K

Pression1 atm

Initialisation

Type d'initialisationfournie par l'utilisateur

Pression initiale1 atm

Température initiale15 °C

Fractions molaires initiales

1	DICHLOROMETHANE	0,0141
2	NITROGEN	0,9859

Sommentation1,0000

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
q _{m0} (mol/kg)	2,329416	q _{m0} (mol/kg)	0
K ₀ (atm ⁻¹)	0,000745	K ₀ (atm ⁻¹)	0
q _{m1} (K)	214,849833	q _{m1} (K)	0
K ₁ (K)	3681,32865	K ₁ (K)	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	
ΔH_{ads} (kJ/mol)	-51	0

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

Alimentations

Caractéristiques

Constituants

Transfert

Autres

Adsorption / Régénération

Bilan financier

Caractéristiques

DICHLOROMETHANE

NITROGEN

Enthalpie d'adsorption

Enthalpie d'adsorption Fourni

Chaleur d'adsorption -51 kJ/mol

Isotherme d'adsorption

Corrélation Langmuir

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

qm0 2,329416 mol/kg

Charger...

K0 0,000745 atm⁻¹

qm1 214,849833 K

K1 3681,32865 K

DICHLOROMETHANE

NITROGEN

Enthalpie d'adsorption

Enthalpie d'adsorption Fourni

Chaleur d'adsorption 0 cal/mol

Isotherme d'adsorption

Corrélation Langmuir

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

qm0 0 mol/kg

Charger...

K0 0 atm⁻¹

qm1 0 K

K1 0 K

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 spécifiées pour la phase solide. Dans ce cas, ils ont été obtenus par comparaison avec des résultats expérimentaux.

	Valeur
Transfert de matière	
Type	Transfert gaz et solide
Transfert de matière phase gaz	
Type	kf calculé, Petrovic-Thodos
Transfert de matière phase solide	
Type	kf fourni
Dichlorométhane	0,008 s ⁻¹
Azote	0 s ⁻¹

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 le coefficient gaz – adsorbant de cet exemple, ou bien fournis, comme le coefficient gaz – paroi de cet exemple. Dans ce cas, il a été obtenu par comparaison avec des résultats expérimentaux.

Transfert thermique	Valeur
Bilans enthalpiques	Pris en compte
Gaz – Adsorbant	Calculé (Satterfield)
Gaz – Paroi Type Coefficient d'échange	Fourni 15 W/m²/K

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 ».

Transfert de matière

Type de transfert : Transfert gaz et solide

Transfert de matière phase gaz

Type de transfert gaz : kf calculé, Petrovic-Thodos

Transfert de matière phase solide

Type de transfert solide : kf fourni

Coefficients de transfert de matière phase solide (s ⁻¹)		
1	DICHLOROMETHANE	0,008
2	NITROGEN	0

Transfert thermique

☒ Bilans enthalpiques ?

Gaz-adsorbant : Calculé (Satterfield)

Gaz-paroi : Fournie

Coefficient d'échange : 15 W/m²/K

Inertie thermique de la paroi

☐ Prise en compte de l'inertie thermique de la paroi

Masse (paroi) : 25 kg

Chaleur spécifique (paroi) : 510 J/kg/K

Epaisseur (paroi) : 0,010937139703 m

Conductivité thermique : 16,4 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.

IdentificationParamètresScriptsRapportCourantsNotesParamètres avancés

AlimentationsCaractéristiquesConstituantsTransfertAutresAdsorption / RégénérationBilan financierImpressionsParamètres

Présence d'une vanne en sortie

Etat au démarrage

Pression à l'ouverture

Coefficient de l'équation

Ouvrir

0

1E-6

Colonne

Pression de sortie

1

Thermodynamique

Modèle d'adsorption

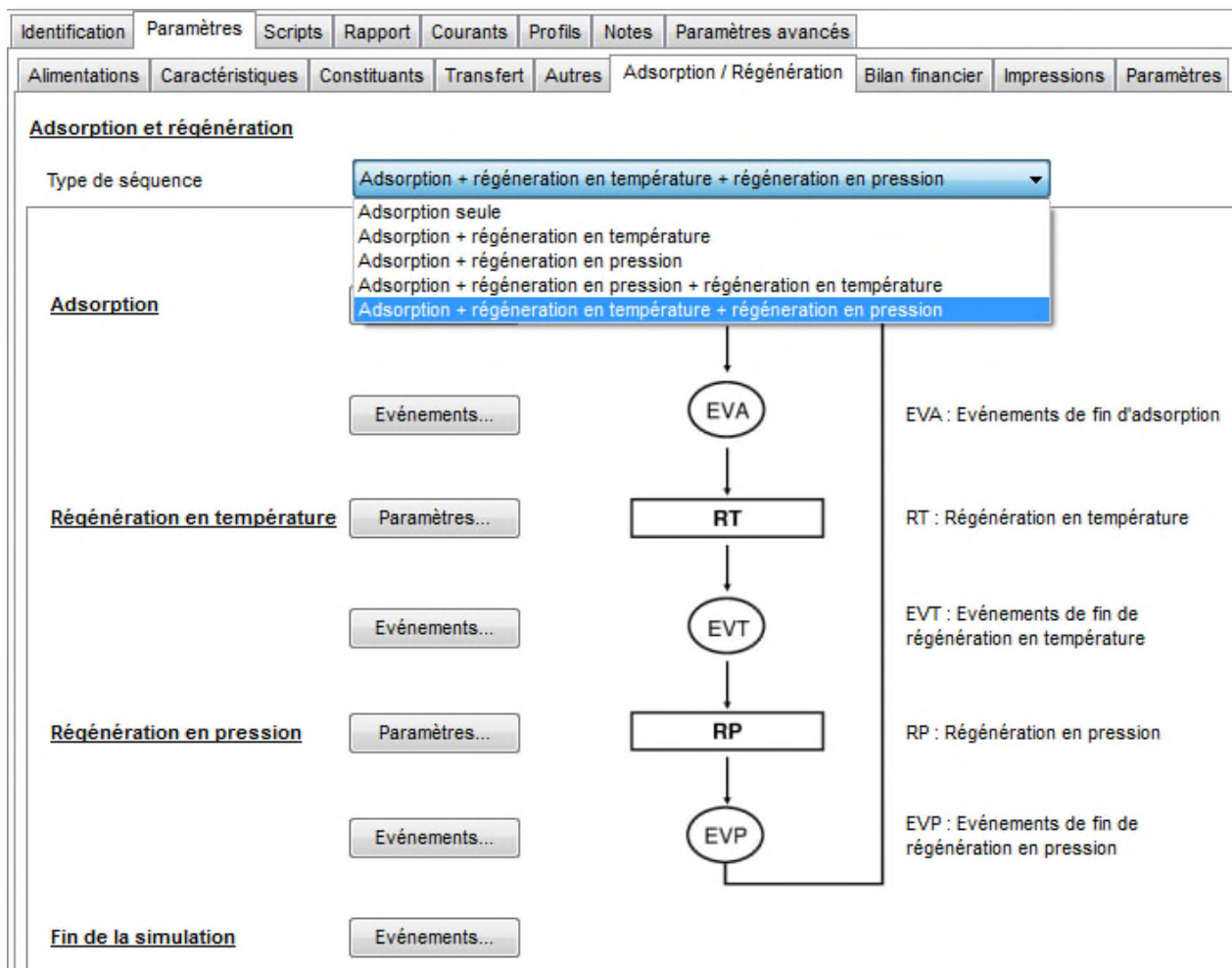
Modèle simple

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 + régénération en pression » est utilisé dans cet exemple pour modéliser un procédé VTSA (Vacuum Thermal Swing Adsorption) comme le montre la copie d'écran ci-dessous.



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

- ✓ Adsorption :
 - o Température de la paroi différente pour cette étape
 - o Quantité de chaleur échangée au sein du lit
- ✓ Régénération en température :
 - o Régénération à co- ou contre-courant
 - o Préchauffage de la colonne dans le lit et/ou la paroi
 - o Refroidissement de la colonne en fin d'étape
 - o Temporisation de la colonne en fin d'étape
 - o Quantité de chaleur échangée au sein du lit
- ✓ Régénération en pression :
 - o Pression à atteindre
 - o Durée de la rampe de pression descendante
 - o Durée de la rampe de pression montante
 - o Coefficient de la vanne
 - o Avertissement en cas de pression non atteinte
 - o Quantité de chaleur échangée au sein du lit

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 « Evénements... ») :

- ✓ Adsorption :
 - o Durée de l'étape
 - o Taux de percée d'un constituant à une position donnée dans la colonne
 - o Concentration en phase gaz d'un constituant à une position donnée dans la colonne
 - o Concentration en phase solide d'un constituant à une position donnée dans la colonne
 - o Température maximale atteinte à une position donnée dans la colonne
 - o Pression maximale atteinte à une position donnée dans la colonne
- ✓ Régénération en température et en pression :
 - o Durée de l'étape
 - o Concentration en phase gaz d'un constituant à une position donnée dans la colonne
 - o Concentration en phase solide d'un constituant à une position donnée dans la colonne
 - o Température maximale atteinte à une position donnée dans la colonne
 - o Pression maximale atteinte à une position donnée dans la colonne
 - o Quantité produite d'un constituant à une position donnée dans la colonne
- ✓ Fin de simulation :
 - o Temps de fin de simulation (voir § 1.5.2) ou nombre de cycles
 - o Quantité totale produite d'un constituant à une position donnée dans la colonne
 - o Température maximale atteinte à une position donnée dans la colonne
 - o Pression maximale atteinte à une position donnée dans la colonne
 - o 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 suivie d'une régénération en pression faite par un flux d'azote à faible pression. Les flux de régénération circulent à contre-courant par rapport au flux d'adsorption.

Séquence	
Type	Adsorption + Régénération en température + Régénération en pression

L'option « Refroidissement de la colonne » étant activée pour l'étape d'adsorption, la température de paroi définie au paragraphe 1.5.3.4 est utilisée uniquement lors des étapes de régénération. La température de la paroi employée lors de l'adsorption est ainsi définie dans les paramètres optionnels de la séquence (voir le tableau ci-dessous).

Adsorption	
Paramètres	
Refroidissement de la colonne	Activé
Température de la paroi	22°C
Quantité de chaleur échangée	0 kcal/h
Evénements	Durée = 18 000 s

A la fin de l'étape d'adsorption et avant le début de l'étape de régénération en température, la colonne est isolée (absence d'alimentation et de production) et le lit est préchauffé uniformément pendant 2400 s avec une puissance de 45 W.

Régénération en température	
Paramètres	
Type de régénération	Contre-courant
Préchauffage de la colonne	Activé
Type de chauffage	Chauffage du lit
Puissance de préchauffage	45 W
Durée de préchauffage	2400 s
Refroidissement de la colonne	Non activée
Temporisation de la colonne	Non activée
Quantité de chaleur échangée	0 kcal/h
Evénements	Durée = 8 400 s

Les paramètres de l'étape de régénération en pression sont propres à l'exemple dont il est question.

Régénération en pression	
Paramètres	
Pression à atteindre	0.039 atm
Durée de la rampe de pression descendante	100 s
Durée de la rampe de pression montante	60 s
Coefficient de la vanne	0.0001
Avertissement en cas de pression non atteinte	Non activé
Quantité de chaleur échangée	0 kcal/h
Evénements	Durée = 2 400 s

Les différentes étapes et la simulation sont arrêtées par une durée.

Fin de la simulation	
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 ».

IdentificationParamètresScriptsRapportCourantsProfilsNotesParamètres avancés

AlimentationsCaractéristiquesConstituantsTransfertAutresAdsorption / RégénérationBilan financierImpressionsParamètres

Coûts de la régénération en température

Coût du flux régénérant

0,18

€/Nm³

Coût du chauffage du flux régénérant

60

€/MWh

Coût du préchauffage du lit

60

€/MWh

Coûts de la régénération en pression

Prix de l'électricité

60

€/MWh

Puissance de la pompe à vide

150

J/s

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 ».

IdentificationParamètresScriptsRapportCourantsProfilsNotesParamètres avancés

AlimentationsCaractéristiquesConstituantsTransfertAutresAdsorption / RégénérationBilan financierImpressionsParamètres

Imprimer

☒ Imprimer les fichiers résultats

Fréquence60s

☐ Imprimer les courbes 3D

Fréquence0,1h

☒ Impression du courant de sortie avec le pas de temps du module

☒ Impression des données d'entrée

Type de résultatsMassique

☐ Détection des inertes

Seuil1E-6kmol

1.5.3.16. 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 5 cellules.

Paramètres	Valeur
Pas d'intégration maximum	60 s
Dérivées	Calculées analytiquement
Nombre de cellules de discrétisation	5
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				Tolérances				
Pas d'intégration max.	60	s	Concentrations partielles	Relative	1E-5	Absolue	1E-5	
Pas initial d'intégration	0,005	s	Concentrations	0,0001	0,0001			
Méthode d'intégration	Matrice creuse, évaluation analytique		Températures	0,001	0,001			
Nombre de pas	2		Pressions	0,001	0,001			
Dérivées	calculé analytiquement		Enthalpies	0,1	0,1			
Paramètres du modèle			Vitesse	0,1	0,1			
Nombre de cellules de discrétisation	5							
Coefficient de dispersion axiale	0		m²/s					
$\Delta H_{\text{Régénération}} / \Delta H_{\text{Adsorption}}$ (ratio)	1							
☒ Prise en compte de l'accumulation de chaleur dans le solide								
Quantité de chaleur appliquée au	Bilan enthalpique gaz							
Durée de la spline cubique	0		h					
Transfert solide	Identique à l'adsorption							

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 1 044 g.

CARACTERISTIQUES GENERALES DE LA COLONNE

Masse d'adsorbant dans la colonne :	1043.85	(G)
Volume de la colonne	: 2.94524	(L)
Volume de solide	: 1.89791	(L)
Volume de vide	: 1.04733	(L)

Avec les paramètres opératoires sélectionnés (voir § 1.5.3.13 entre-autre), le lit d'adsorbant n'est pas totalement régénéré : 311 g de dichlorométhane adsorbé et 289 g récupéré lors de la régénération (223 g par la régénération en température et 66 g par la régénération en pression).

QUANTITE ADSORBEE (G)

CONSTITUANT	Cycle N° 1
DICHLOROMETHANE	310.724
NITROGEN	-5.882695E-02

QUANTITE RECUPEREE DURANT LA REGENERATION EN TEMPERATURE (G)

CONSTITUANT	Cycle N° 1
DICHLOROMETHANE	222.834
NITROGEN	1041.75

QUANTITE RECUPEREE DURANT LA REGENERATION EN PRESSION (G)

CONSTITUANT	Cycle N° 1
DICHLOROMETHANE	65.8272
NITROGEN	45.8530

QUANTITE RECUPEREE TOTALE (G)

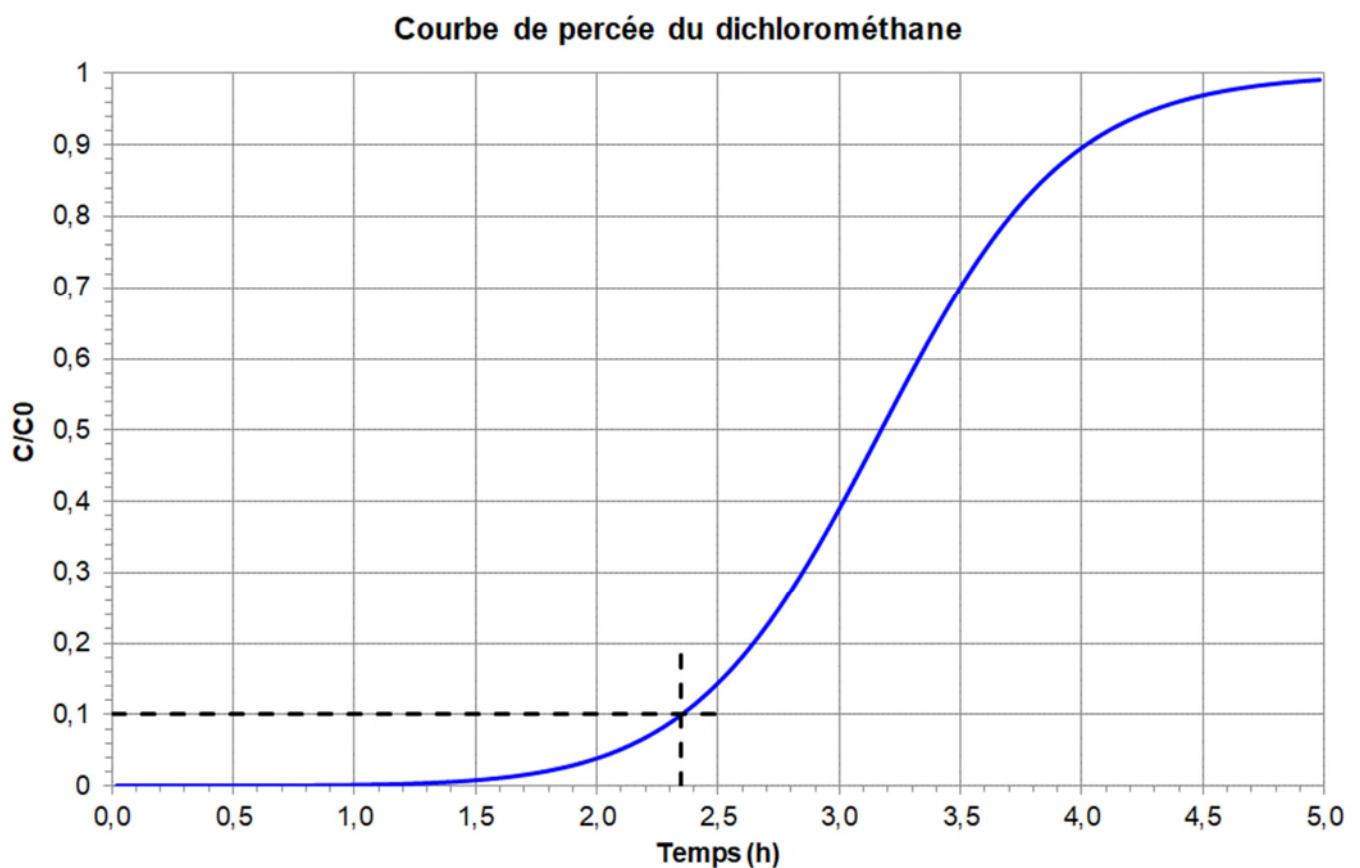
CONSTITUANT	QUANTITE
DICHLOROMETHANE	288.661
NITROGEN	1087.60

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

2.2. 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 2h21min. Le lit d'adsorbant est saturé lorsque la concentration en sortie est égale à celle en entrée. Ceci se produit au bout de 5h.



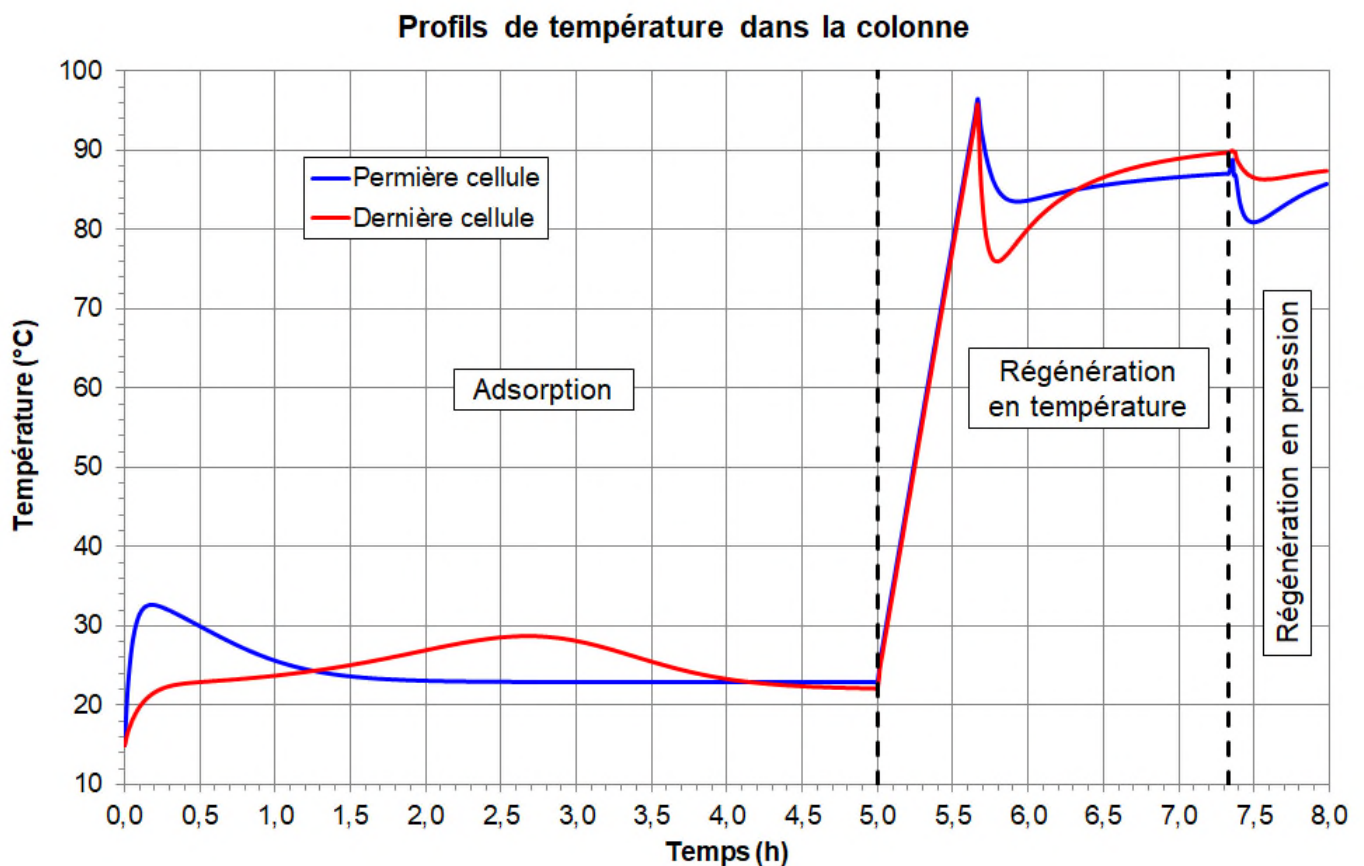
La figure ci-après présente le profil de température dans la première et la dernière cellule de discrétisation. Dans le cas de l'adsorption :

- ✓ 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 :

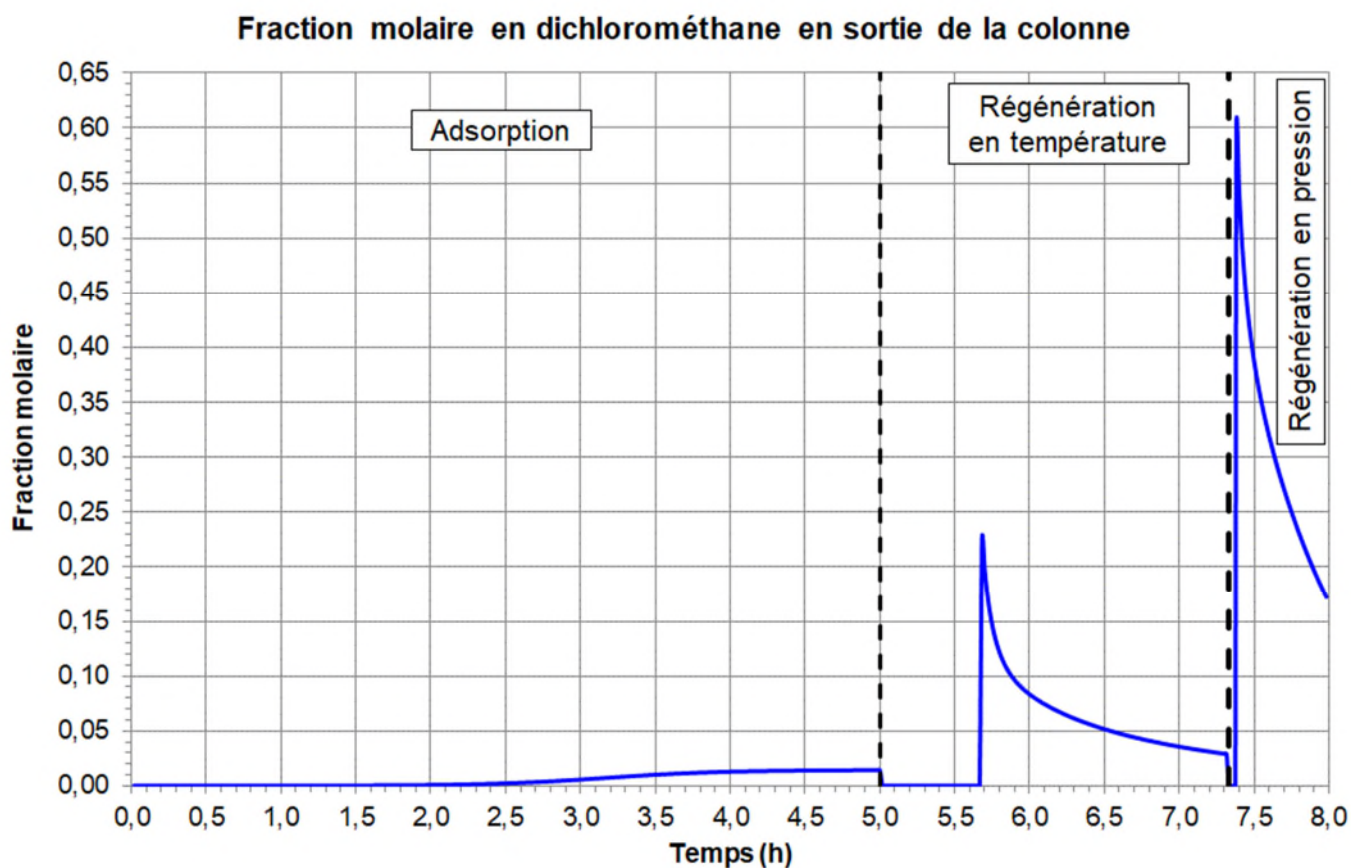
- ✓ Première cellule : Cellule de sortie de la colonne
- ✓ Dernière cellule : Cellule d'entrée de la colonne

Les profils de température lors de l'étape d'adsorption permettent de mettre en évidence le pic de température correspondant. La montée linéaire en début d'étape de régénération en température correspond au préchauffage du lit en absence d'alimentation ou de production. Lors des deux étapes de régénération (en température, puis en pression), les profils de température présentent d'abord une chute due à la désorption du dichlorométhane (phénomène endothermique). Ensuite, la température augmente jusqu'à tendre à un équilibre entre la température de paroi et la température du flux gazeux.



2.3. Profils du courant de sortie

La figure ci-après 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. La même chose s'observe pour la régénération en pression. Celle-ci permet d'aller plus loin dans la régénération du lit. Toutefois, dans cet exemple, la simulation est arrêtée avant une 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)