

## EXEMPLE D'APPLICATION PROSIM DAC

# CRYOSORPTION D'UN MELANGE D'ISOTOPES DE L'HYDROGENE

### INTERET DE L'EXEMPLE

Cet exemple traite de la cryosorption d'un mélange d'isotopes de l'hydrogène pour le recyclage du tritium généré dans le ciel gazeux d'un réacteur de fusion deutérium – tritium. Le modèle thermodynamique d'adsorption IAS est utilisé pour prendre en compte la compétition entre les isotopes vis-à-vis des sites d'adsorption d'un tamis moléculaire 5A. Ce procédé est modélisé dans *ProSim DAC*, le logiciel de simulation dynamique de Fives ProSim dédié aux colonnes d'adsorption gaz-solide.

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

|                                  |                                             |
|----------------------------------|---------------------------------------------|
| FICHIER PROSIM DAC CORRESPONDANT | <i>PSPDYN_EX_FR-H2-D2-cryosorption.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](http://www.fivesgroup.com) / [www.fives-prosim.com](http://www.fives-prosim.com)

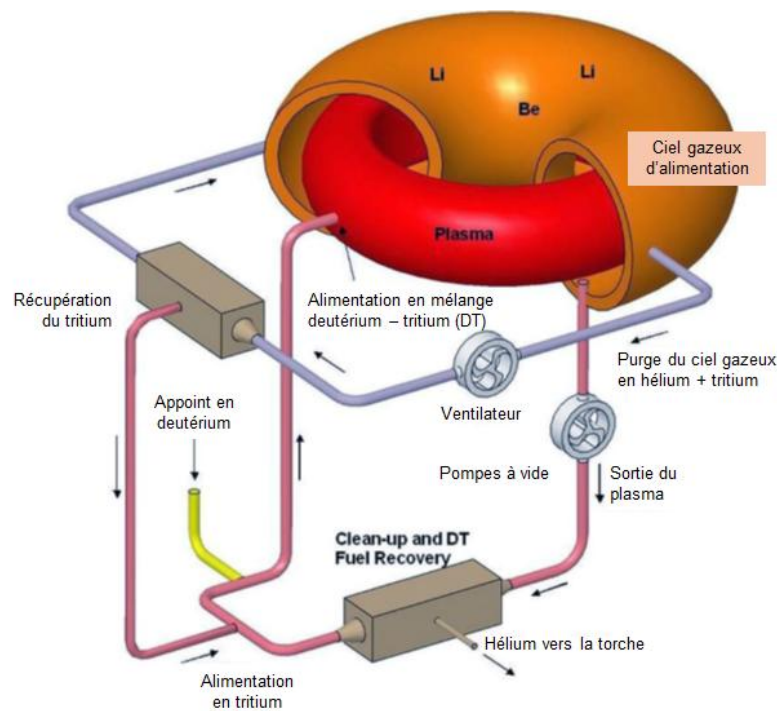
## TABLE DES MATIERES

|           |                                                        |           |
|-----------|--------------------------------------------------------|-----------|
| <b>1.</b> | <b>MODELISATION DU PROCEDE .....</b>                   | <b>3</b>  |
| 1.1.      | Présentation du procédé .....                          | 3         |
| 1.2.      | Schéma de simulation .....                             | 5         |
| 1.3.      | Constituants .....                                     | 5         |
| 1.4.      | Modèle thermodynamique.....                            | 5         |
| 1.5.      | Paramètres opératoires.....                            | 6         |
| 1.5.1.    | Alimentations du procédé.....                          | 6         |
| 1.5.2.    | Durée de simulation .....                              | 6         |
| 1.5.3.    | Colonne d'adsorption .....                             | 7         |
| <b>2.</b> | <b>RESULTATS .....</b>                                 | <b>19</b> |
| 2.1.      | Rapport de simulation de la colonne d'adsorption ..... | 19        |
| 2.2.      | Profils de la colonne d'adsorption .....               | 20        |
| 2.3.      | Profils des courants de sortie .....                   | 21        |
| <b>3.</b> | <b>BIBLIOGRAPHIE .....</b>                             | <b>22</b> |

## 1. MODELISATION DU PROCEDE

### 1.1. Présentation du procédé

La figure suivante présente un schéma de réacteur de fusion deutérium – tritium (réacteur DT) [HOS21]. L'un des aspects technologiques est le retraitement de la purge en hélium et tritium du ciel gazeux du tore de plasma afin de récupérer le tritium gazeux et le réinjecter comme combustible dans le ciel gazeux.



Pour l'utiliser comme combustible, le tritium généré dans le ciel gazeux doit être extrait des matériaux du surgénérateur et transféré dans le gaz de balayage. 4 méthodes existent pour récupérer le tritium à partir de l'hélium de balayage :

- ✓ Adsorption après oxydation : le gaz de balayage est introduit dans un lit catalytique pour transformer le tritium gazeux en vapeur d'eau tritiée. Cette vapeur est ensuite piégée par un lit adsorbant poreux.
- ✓ Fixation par échange isotopique : le gaz de balayage est introduit dans un lit garni d'un catalyseur à base de métal précieux sur un substrat poreux hydrophile, tel que l'alumine activée, les tamis moléculaires, le gel de silice, etc. Une réaction d'échange isotopique se produit entre le tritium présent dans le flux gazeux et l'hydrogène présent dans le substrat. Le tritium présent dans le flux gazeux est alors fixé dans le substrat du catalyseur, libérant ainsi de l'hydrogène. De plus, l'eau tritiée en phase gazeuse est piégée par adsorption à la surface du substrat. Ainsi, le tritium, sous ses deux formes chimiques, est piégé dans le même lit.
- ✓ Absorption : le gaz de balayage est introduit dans un lit de pastilles métalliques (uranium, titane poreux, zirconium poreux, zirconium-cobalt, etc.). Seul le tritium gazeux est piégé par absorption dans ces métaux.
- ✓ Cryosorption : le gaz de balayage est introduit dans un lit d'adsorbant poreux, tel que des tamis moléculaires, du charbon actif, etc., refroidi à l'azote ou à l'hélium liquide. Le tritium gazeux et la vapeur d'eau tritiée en phase gazeuse sont piégés par adsorption sur l'adsorbant.

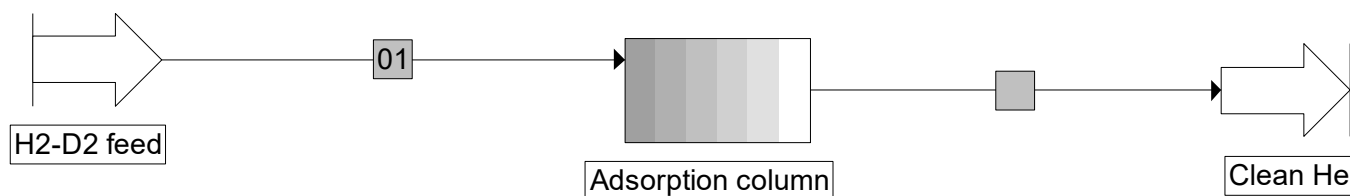
[NIS94] a étudié la faisabilité de la cryosorption utilisant des adsorbants poreux tel que des tamis moléculaires ou du charbon actif. [NIS94] a constaté que la cryosorption était intéressante pour la récupération du tritium gazeux à partir de l'hélium de balayage saturé en hydrogène. [WIL93] et [WIL95] ont montré que le tamis moléculaire 5A refroidi à l'azote liquide possède une affinité et une capacité d'adsorption importante pour les isotopes d'hydrogène. Lorsque l'hélium chargé d'hydrogène est utilisé comme gaz de balayage, il est supposé qu'une centaine de Pascal d'hydrogène et quelques Pascal de tritium dans l'hélium doivent être traités.

Pour la conception du procédé de cryosorption, un outil de simulation est pratique pour passer de l'échelle du laboratoire (simulation des expériences d'adsorption, validation des isothermes, du modèle de thermodynamique d'adsorption, etc.) à l'échelle industrielle. Ceci est une des applications possibles de *ProSim DAC*, le logiciel de simulation dynamique de Fives ProSim dédié aux colonnes d'adsorption gaz-solide.

Cet exemple est fondé sur la publication [NIS95]. Cette publication décrit l'adsorption dans une colonne de laboratoire de mélanges  $H_2 - D_2$ ,  $H_2 - HD$ ,  $HD - D_2$  et  $H_2 - HT$  dans des flux d'hélium-4 et sur trois adsorbants : des tamis moléculaire 4A et 5A et un charbon actif. Les expériences relatives aux mélanges  $H_2 - D_2$  sur tamis moléculaire 5A sont retenues dans cet exemple car elles présentent un effet très visible de la compétition de ces deux constituants vis-à-vis des sites d'adsorption. La simulation mise en place pour représenter ce phénomène est simple. L'alimentation « H2-D2 feed » permet de décrire le flux d'hélium-4 à épurer. Les paramètres de la colonne d'adsorption « Adsorption column » permettent de représenter les conditions expérimentales de [NIS95]. La sortie « Clean He » permet de collecter la sortie gaz de la colonne d'adsorption.

## 1.2. Schéma de simulation

Le schéma de simulation est présenté sur la figure suivante.



## 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 purs sont extraites de la base de données standard livrée avec ProSim DAC [ROW24].

| Constituant | Formule chimique | Numéro CAS |
|-------------|------------------|------------|
| Hydrogène   | H <sub>2</sub>   | 1333-74-0  |
| Deutérium   | D <sub>2</sub>   | 7782-39-0  |
| Hélium-4    | He               | 7440-59-7  |

## 1.4. Modèle thermodynamique

L'adsorption est réslisée à la pression atmosphérique et à température cryogénique (77.4 K). Le profil thermodynamique « Idéal » est ainsi sélectionné dans le calculator Simulis Thermodynamics.

<sup>1</sup> CAS Registry Numbers<sup>®</sup> are the intellectual property of the American Chemical Society and are used by Fives ProSim SAS with the express permission of ACS. CAS Registry Numbers<sup>®</sup> have not been verified by ACS and may be inaccurate.

## 1.5. Paramètres opératoires

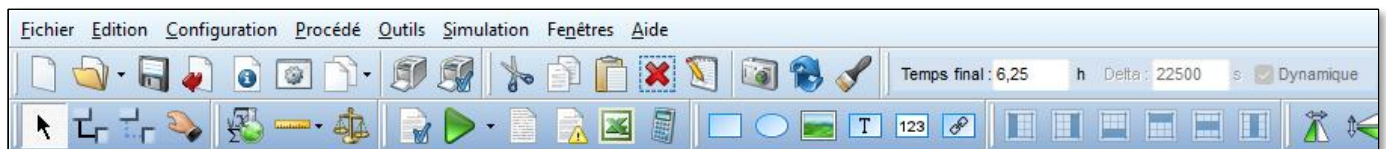
### 1.5.1. Alimentations du procédé

Les caractéristiques de l'alimentation du procédé est décrit dans le tableau ci-dessous.

|                                  | H2-D2 feed |
|----------------------------------|------------|
| Température (K)                  | 77.4       |
| Pression (atm)                   | 1          |
| Débit total (Nm <sup>3</sup> /h) | 0.012      |
| Fractions molaires               |            |
| Hydrogène                        | 0.005856   |
| Deutérium                        | 0.005607   |
| Hélium-4                         | 0.988537   |

### 1.5.2. Durée de simulation

Le « Temps final » est la durée opératoire réelle de l'adsorption. Le « Temps final » est renseigné au niveau des barres d'icônes de *ProSim DAC* :



| Durée de simulation | Valeur |
|---------------------|--------|
| Temps final         | 6.25 h |

### 1.5.3. Colonne d'adsorption

#### 1.5.3.1. Alimentation

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 (inerte chaud, vapeur d'eau...)                        |
| ✓ Flux pour la régénération en pression :    | Flux servant lors de la régénération en pression (inerte à pression inférieure à celle de l'adsorption...) |
| ✓ Flux pour le refroidissement :             | Flux servant à refroidir la colonne en fin d'étape de régénération en température                          |

Seule la première alimentation sert dans cet exemple comme le montre la copie d'écran ci-dessous.

The screenshot shows the 'Paramètres' (Parameters) tab in the software. Under the 'Alimentations' (Feed) section, the following options are visible:

- ☒ Flux d'adsorbats : 01
- ☐ Flux pour la régénération en température :
- ☐ Flux pour la régénération en 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 les étapes de régénération |

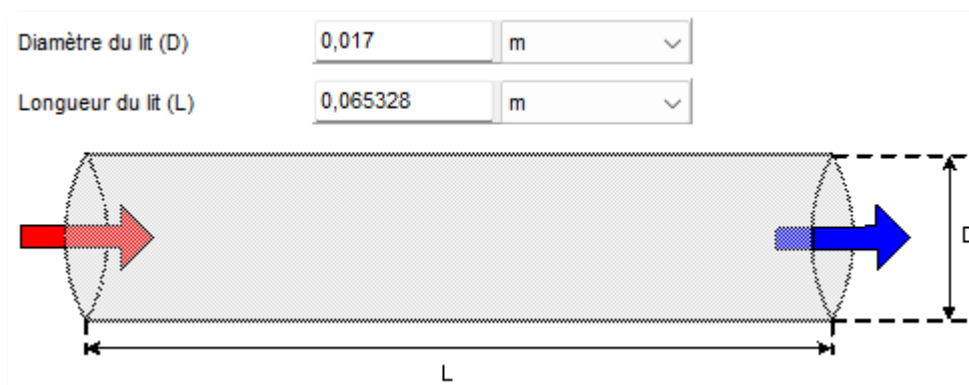
La copie d'écran ci-dessous montre la sortie utilisée.

The screenshot shows the 'Sorties' (Outputs) section in the software. The following options are visible:

- ☒ Etapes d'adsorption : 02
- ☐ Etapes de régénération :

### 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.



La longueur du lit d'adsorbant,  $L$ , n'est pas précisée dans [NIS95]. Elle est calculée à partir de trois grandeurs spécifiées dans [NIS95], la masse d'adsorbant,  $m_{ads} = 9.49 \text{ g}$ , la masse volumique du lit,  $\rho_{bed} = 640 \text{ kg/m}^3$  et le diamètre du lit  $d_{bed} = 0.017 \text{ m}$ , via la relation ci-dessous :

$$L = m_{ads} \frac{1}{\rho_{bed}} \frac{4}{\pi d_{bed}}$$

### 1.5.3.4. Comportement thermique

*ProSim DAC* permet de modéliser les modes d'échange thermique suivants :

- ✓ 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 d'énergie thermique direct dans le lit d'adsorbant. La température de la paroi spécifiée dans l'onglet « Caractéristiques » est celle de la paroi lors de l'adsorption

| Comportement thermique  |                                  |
|-------------------------|----------------------------------|
| Transfert thermique     | Q donnée et transfert à la paroi |
| Température de la paroi | 77.4K                            |



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

| Caractéristique du lit d'adsorbant |                                     |
|------------------------------------|-------------------------------------|
| Degré de vide du lit               | 0.36 m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> |

Le degré de vide du lit,  $\varepsilon_{bed}$ , a été calculé à partir de la masse volumique du lit,  $\rho_{bed} = 640 \text{ kg/m}^3$  [NIS95] et l'hypothèse retenue pour la masse volumique des particules  $\rho_p = 1000 \text{ kg/m}^3$  via la relation suivante :

$$\rho_{bed} = \rho_p(1 - \varepsilon_{bed})$$

#### 1.5.3.6. Caractéristiques de l'adsorbant

La masse volumique des particules tient compte de la porosité intra-particulaire. Le rapport surface/volume est le rapport entre la surface géométrique et le volume géométrique d'une des particules. La masse volumique et la chaleur spécifique des particules ne sont pas spécifiées dans [NIS95]. Des hypothèses sont retenues dans cet exemple.

| Caractéristiques des particules |                                      |
|---------------------------------|--------------------------------------|
| Diamètre                        | 0.0625 in                            |
| Masse volumique                 | 1 000 kg/m <sup>3</sup>              |
| Chaleur spécifique              | 945 J/kg/K                           |
| Rapport surface/volume          | 3 780 m <sup>2</sup> /m <sup>3</sup> |

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

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.

| Conditions des mesures | Valeur   |
|------------------------|----------|
| Conditions             | Normales |

### 1.5.3.8. Initialisation

Il est nécessaire de définir l'état de la colonne au démarrage. Dans cet exemple, il est supposé que la colonne est remplie d'hélium-4 pur à la température et la pression du gaz à épurer.

| Initialisation    | Valeur                    |
|-------------------|---------------------------|
| Type              | Fournie par l'utilisateur |
| Pression          | 1 atm                     |
| Température       | 77.4 K                    |
| Factions molaires |                           |
| Hydrogène         | 0                         |
| Deutérium         | 0                         |
| Hélium-4          | 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 ».

IdentificationParamètresScriptsRapportCourantsProfilsNotesParamètres avancés

CourantsCaractéristiquesConstituantsTransfertAutresAdsorption / RégénérationBilan financierImpressionsParamètres

Colonne

Type de colonneColonne à flux longitudinal

Editor...

Transfert thermiqueQ donnée et transfert à la paroi

Température de la paroi77,4 K

AdsorbantCharger...

Degré de vide du lit0,36 m³/m³

Diamètre des particules0,0625 in

Densité des particules1000 kg/m³

Chaleur spécifique du solide945 J/kg/K

Rapport surface/volume3780 m²/m³

Conditions (T,P) des mesures

ConditionsNormales

Initialisation

Type d'initialisationfournie par l'utilisateur

Pression initiale1 atm

Température initiale77,4 K

Fractions molaires initiales

|   |           |   |
|---|-----------|---|
| 1 | HYDROGEN  | 0 |
| 2 | DEUTERIUM | 0 |
| 3 | HELIUM-4  | 1 |

Sommentation1,0000

### 1.5.3.9. Isotherme d'adsorption

L'isotherme de Langmuir étendue est utilisée avec les paramètres de [NIS95] pour l'hydrogène et le deutérium :

$$q_i = \frac{q_{m0}^{(1)} \exp\left(\frac{q_{m1}^{(1)}}{T}\right) K_0^{(1)} \exp\left(\frac{K_1^{(1)}}{T}\right) P_i}{1 + K_0^{(1)} \exp\left(\frac{K_1^{(1)}}{T}\right) P_i} + \frac{q_{m0}^{(2)} \exp\left(\frac{q_{m1}^{(2)}}{T}\right) K_0^{(2)} \exp\left(\frac{K_1^{(2)}}{T}\right) P_i}{1 + K_0^{(2)} \exp\left(\frac{K_1^{(2)}}{T}\right) P_i}$$

|                                  | Hydrogène | Deutérium |
|----------------------------------|-----------|-----------|
| $q_{m0}^{(1)}$ (mol/kg)          | 1,518519  | 1,348315  |
| $K_0^{(1)}$ (atm <sup>-1</sup> ) | 270       | 890       |
| $q_{m1}^{(1)}$ (K)               | 0         | 0         |
| $K_1^{(1)}$ (K)                  | 0         | 0         |
| $q_{m0}^{(2)}$ (mol/kg)          | 1,692308  | 3,166667  |
| $K_0^{(2)}$ (atm <sup>-1</sup> ) | 13        | 12        |
| $q_{m1}^{(2)}$ (K)               | 0         | 0         |
| $K_1^{(2)}$ (K)                  | 0         | 0         |

Il est supposé que l'hélium-4 ne s'adsorbe que très faiblement. Il est représenté par une isotherme linéaire dont les paramètres sont regroupés dans le tableau ci-après.

$$q_i = K_0 \exp\left(\frac{K_1}{T}\right) P_i$$

|                    |                  |
|--------------------|------------------|
| $K_0$ (mol/kg/atm) | 10 <sup>-6</sup> |
| $K_1$ (K)          | 0                |

La simulation est isotherme. Les enthalpies d'adsorption sont mises à zéro.

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

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

Caractéristiques

HYDROGEN  
DEUTERIUM  
HELIUM-4

**Enthalpie d'adsorption**  
Enthalpie d'adsorption Fourni  
Chaleur d'adsorption 0 cal/mol Charger...

**Isotherme d'adsorption**  
Corrélation Langmuir étendu

$$q_i = \frac{\left[ q_{m0}^{(i)} \exp\left(\frac{q_{m1}^{(i)}}{T}\right) \right] \left[ K_0^{(i)} \exp\left(\frac{K_1^{(i)}}{T}\right) P_i \right]}{1 + \left[ K_0^{(i)} \exp\left(\frac{K_1^{(i)}}{T}\right) P_i \right]} + \frac{\left[ q_{m0}^{(2)} \exp\left(\frac{q_{m1}^{(2)}}{T}\right) \right] \left[ K_0^{(2)} \exp\left(\frac{K_1^{(2)}}{T}\right) P_i \right]}{1 + \left[ K_0^{(2)} \exp\left(\frac{K_1^{(2)}}{T}\right) P_i \right]}$$

qm0<sup>1</sup> 1,518519 mol/kg qm0<sup>2</sup> 1,692308 mol/kg  
K0<sup>1</sup> 270 atm<sup>-1</sup> K0<sup>2</sup> 13 atm<sup>-1</sup>  
qm1<sup>1</sup> 0 K qm1<sup>2</sup> 0 K  
K1<sup>1</sup> 0 K K1<sup>2</sup> 0 K

HYDROGEN  
DEUTERIUM  
HELIUM-4

**Enthalpie d'adsorption**  
Enthalpie d'adsorption Fourni  
Chaleur d'adsorption 0 cal/mol Charger...

**Isotherme d'adsorption**  
Corrélation Langmuir étendu

$$q_i = \frac{\left[ q_{m0}^{(i)} \exp\left(\frac{q_{m1}^{(i)}}{T}\right) \right] \left[ K_0^{(i)} \exp\left(\frac{K_1^{(i)}}{T}\right) P_i \right]}{1 + \left[ K_0^{(i)} \exp\left(\frac{K_1^{(i)}}{T}\right) P_i \right]} + \frac{\left[ q_{m0}^{(2)} \exp\left(\frac{q_{m1}^{(2)}}{T}\right) \right] \left[ K_0^{(2)} \exp\left(\frac{K_1^{(2)}}{T}\right) P_i \right]}{1 + \left[ K_0^{(2)} \exp\left(\frac{K_1^{(2)}}{T}\right) P_i \right]}$$

qm0<sup>1</sup> 1,348315 mol/kg qm0<sup>2</sup> 3,166667 mol/kg  
K0<sup>1</sup> 890 atm<sup>-1</sup> K0<sup>2</sup> 12 atm<sup>-1</sup>  
qm1<sup>1</sup> 0 K qm1<sup>2</sup> 0 K  
K1<sup>1</sup> 0 K K1<sup>2</sup> 0 K

HYDROGEN  
DEUTERIUM  
HELIUM-4

**Enthalpie d'adsorption**  
Enthalpie d'adsorption Fourni  
Chaleur d'adsorption 0 cal/mol

**Isotherme d'adsorption**  
Corrélation Isotherme linéaire

$$q_i = K_0 \exp\left(\frac{K_1}{T}\right) P_i$$

K0 1E-6 mol/kg/atm  
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 uniquement dans la phase solide. Les coefficients de transfert de matière sont spécifiés.

|                                          | Valeur                  |
|------------------------------------------|-------------------------|
| <b>Transfert de matière</b>              |                         |
| Type                                     | Transfert gaz et solide |
| <b>Transfert de matière phase gaz</b>    |                         |
| Type                                     | Pas de résistance       |
| <b>Transfert de matière phase solide</b> |                         |
| Type                                     | kf fourni               |
| Hydrogène                                | 0.005 s <sup>-1</sup>   |
| Deutérium                                | 0.005 s <sup>-1</sup>   |
| Hélium-4                                 | 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 ou fournis. La simulation de cet exemple est isotherme à la température du gaz à épurer (77.4 K) pour être conforme aux travaux de [NIS95].

| Transfert thermique | Valeur             |
|---------------------|--------------------|
| Bilans enthalpiques | Non pris en compte |

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 ».

IdentificationParamètresScriptsRapportCourantsProfilsNotesParamètres avancés

CourantsCaractéristiquesConstituantsTransfertAutresAdsorption / RégénérationBilan financierImpressionsParamètres

Transfert de matière

Type de transfert

Transfert gaz et solide

Transfert de matière phase gaz

Type de transfert gaz

Pas de résistance

Transfert de matière phase solide

Type de transfert solide

kf fourni

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

|   |           |       |
|---|-----------|-------|
|   |           |       |
| 1 | HYDROGEN  | 0,005 |
| 2 | DEUTERIUM | 0,005 |
| 3 | HELIUM-4  | 0     |

Transfert thermique

☐ Bilans enthalpiques ?

Gaz-adsorbant

Calculé (Satterfield)

Gaz-paroi

Calculé (Leva)

Inertie thermique de la paroi

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

Masse (paroi)

0

kg

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

Copyright © 2025 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

www.fives-prosim.com

### 1.5.3.12. Modèle thermodynamique d'adsorption

Pour cet exemple, le modèle thermodynamique d'adsorption IAS (Ideal Adsorption Solution) [MYE65] est utilisé. Il permet de prendre en compte la compétition entre molécules vis-à-vis des sites d'adsorption.

|                                                         |                  |                                               |           |         |                           |                 |             |                    |
|---------------------------------------------------------|------------------|-----------------------------------------------|-----------|---------|---------------------------|-----------------|-------------|--------------------|
| Identification                                          |                  | Paramètres                                    | Scripts   | Rapport | Courants                  | Profils         | Notes       | Paramètres avancés |
| Courants                                                | Caractéristiques | Constituants                                  | Transfert | Autres  | Adsorption / Régénération | Bilan financier | Impressions | Paramètres         |
| <b><u>Vanne</u></b>                                     |                  | <b><u>Thermodynamique</u></b>                 |           |         |                           |                 |             |                    |
| <input type="checkbox"/> Présence d'une vanne en sortie |                  | Modèle d'adsorption <span>IAS ou RAS</span> ▼ |           |         |                           |                 |             |                    |
| Etat au démarrage                                       |                  | <span>Ouvrir</span> ▼                         |           |         |                           |                 |             |                    |
| Pression à l'ouverture                                  |                  | <span>0</span> <span>atm</span> ▼             |           |         |                           |                 |             |                    |
| Coefficient de l'équation                               |                  | <span>1E-6</span>                             |           |         |                           |                 |             |                    |
| <b><u>Colonne</u></b>                                   |                  |                                               |           |         |                           |                 |             |                    |
| Pression de sortie                                      |                  | <span>1</span> <span>atm</span> ▼             |           |         |                           |                 |             |                    |

### 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 seule » est utilisé dans cet exemple comme le montre la copie d'écran ci-dessous.

The screenshot shows the 'Paramètres' tab with the 'Adsorption / Régénération' sub-tab selected. Under 'Type de séquence', a dropdown menu is open, showing five options: 'Adsorption seule' (selected), 'Adsorption + régénération en température', 'Adsorption + régénération en pression', 'Adsorption + régénération en pression + régénération en température', and 'Adsorption + régénération en température + régénération en pression'. Below this, the 'Adsorption' stage is configured with 'Paramètres...' and 'Evénements...' buttons. The 'Fin de la simulation' stage has an 'Evénements...' button. A flow diagram shows a box labeled 'A' with arrows indicating the sequence from 'Adsorption' to 'Fin de la simulation'.

Les paramètres de l'étape d'adsorption sont :

| Adsorption |                   |
|------------|-------------------|
| Paramètres | Valeur par défaut |
| Evénement  | Durée = 22 500 s  |

L'événement de fin de simulation est :

| Fin de simulation |                            |
|-------------------|----------------------------|
| Evénement         | 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 ».

#### 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 = 100 s |
| Impression du courant de sortie avec le pas de temps du module | Oui               |
| Impression des données d'entrée                                | Oui               |
| Type de résultats                                              | Massique          |
| Autres paramètres                                              | Valeur par défaut |

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

Identification Paramètres Scripts Rapport Courants Profils Notes Paramètres avancés

Courants Caractéristiques Constituants Transfert Autres Adsorption / Régénération Bilan financier **Impressions** Paramètres

**Imprimer**

☒ Imprimer les fichiers résultats

Fréquence 100 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

1.5.3.16. Paramètres

ProSim DAC donne accès à un certain nombre de paramètres numériques et des modèles. Le modèle repose sur une intégration numérique temporelle et une discrétisation spatiale. La colonne est ici discrétisée en 10 cellules afin d'obtenir une résolution « fine » du problème.

| Paramètres du modèle                 | Valeur            |
|--------------------------------------|-------------------|
| Nombre de cellules de discrétisation | 10                |
| Autres paramètres                    | Valeur par défaut |

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

IdentificationParamètresScriptsRapportCourantsProfilsNotesParamètres avancés

CourantsCaractéristiquesConstituantsTransfertAutresAdsorption / RégénérationBilan financierImpressionsParamètres

Intégration

Pas d'intégration max.

500

s

Pas initial d'intégration

0,005

s

Méthode d'intégration

Matrice creuse, évaluation analytique

Nombre de pas

2

Dérivées

calculé analytiquement

Paramètres du modèle

Nombre de cellules de discrétisation

10

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

Tolérances (adsorption)

Relative

Absolue

Concentrations partielles

1E-5

1E-5

mol/m³

Concentrations

0,0001

0,0001

mol/m³

Températures

0,001

0,001

K

Pressions

0,001

0,001

atm

Enthalpies

0,1

0,1

J/kg

Vitesse

0,1

0,1

m/s

Production

0,0001

0,0001

Tolérances (régénération)

Relative

Absolue

Concentrations partielles

1E-5

1E-5

mol/m³

Concentrations

0,0001

0,0001

mol/m³

Températures

0,001

0,001

K

Pressions

0,001

0,001

atm

Enthalpies

0,1

0,1

J/kg

Vitesse

0,1

0,1

m/s

Production

0,0001

0,0001

## 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, etc.

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 de 9.49 g.

#### CARACTERISTIQUES GENERALES DE LA COLONNE

|                                     |           |       |
|-------------------------------------|-----------|-------|
| Masse d'adsorbant dans la colonne : | 9.49002   | (g)   |
| Volume de la colonne                | : 14.8282 | (cm3) |
| Volume de solide                    | : 9.49002 | (cm3) |
| Volume de vide                      | : 5.33814 | (cm3) |

Avec les paramètres opératoires sélectionnés (voir § 1.5.3. entre-autre), il s'adsorbe 8,9 mg d'hydrogène et 40 mg de deutérium. La quantité adsorbée d'hélium-4 est l'écart au bilan matière dû à la résolution numérique.

#### QUANTITE ADSORBEE (g)

Ces valeurs intègrent l'inventaire de la phase gaz de la colonne.

| CONSTITUANT | Cycle N° 1    |
|-------------|---------------|
| HYDROGEN    | 8.863256E-03  |
| DEUTERIUM   | 3.991413E-02  |
| HELIUM-4    | -3.860674E-05 |

## 2.2. Profils de la colonne d'adsorption

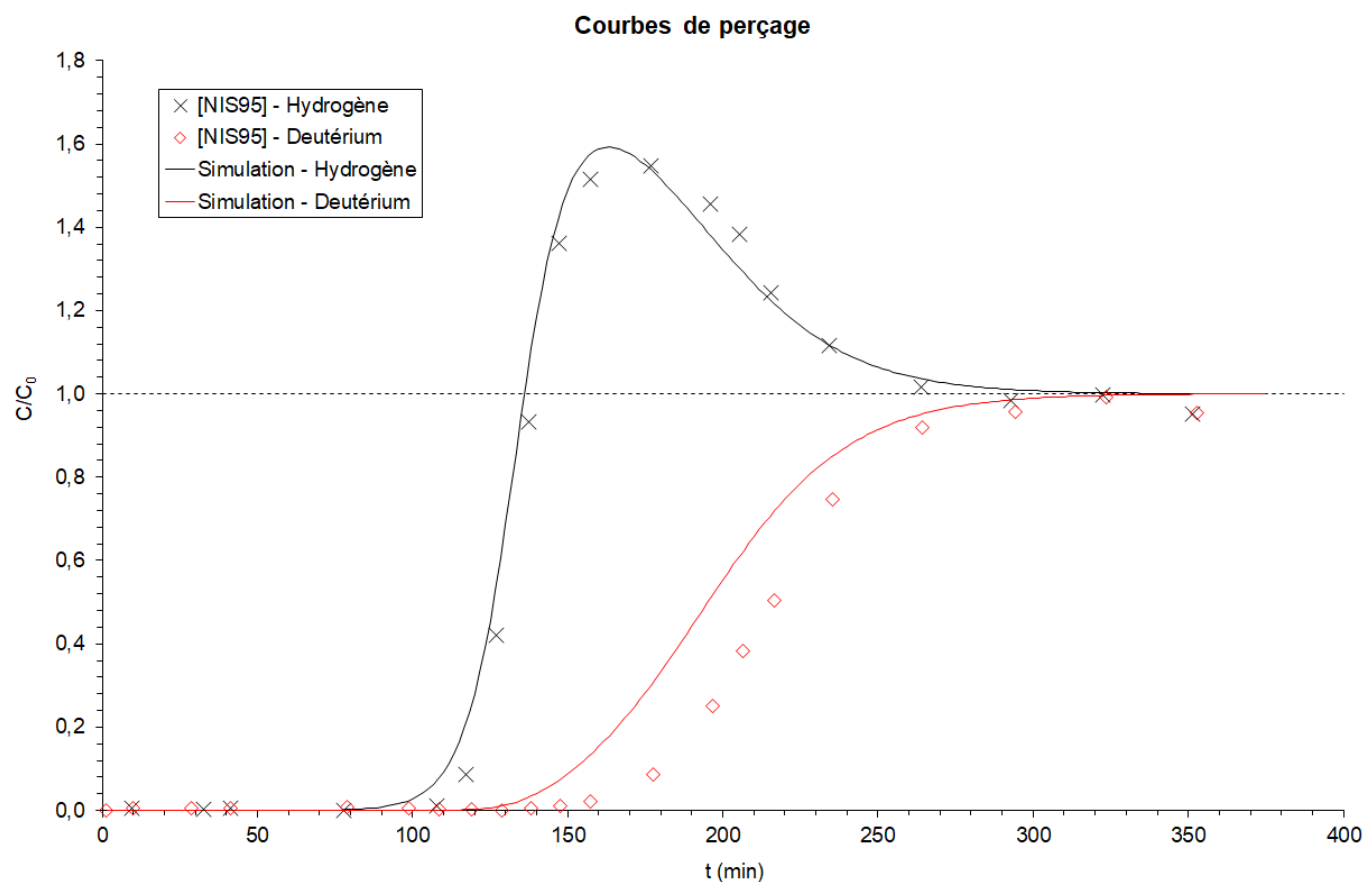
Plusieurs profils (températures, pressions, vitesses, concentrations, fractions molaire ou massique et courbes de percée) dans la colonne d'adsorption sont disponibles à la fin de la simulation dans la fenêtre d'édition (onglet « Profils »). Ces profils comportent deux courbes :

- ✓ « Première cellule » : Cellule d'entrée de la colonne dans le sens du flux d'adsorption
- ✓ « Dernière cellule » : Cellule de sortie de la colonne dans le sens du flux d'adsorption

Si une régénération a lieu à contre-courant :

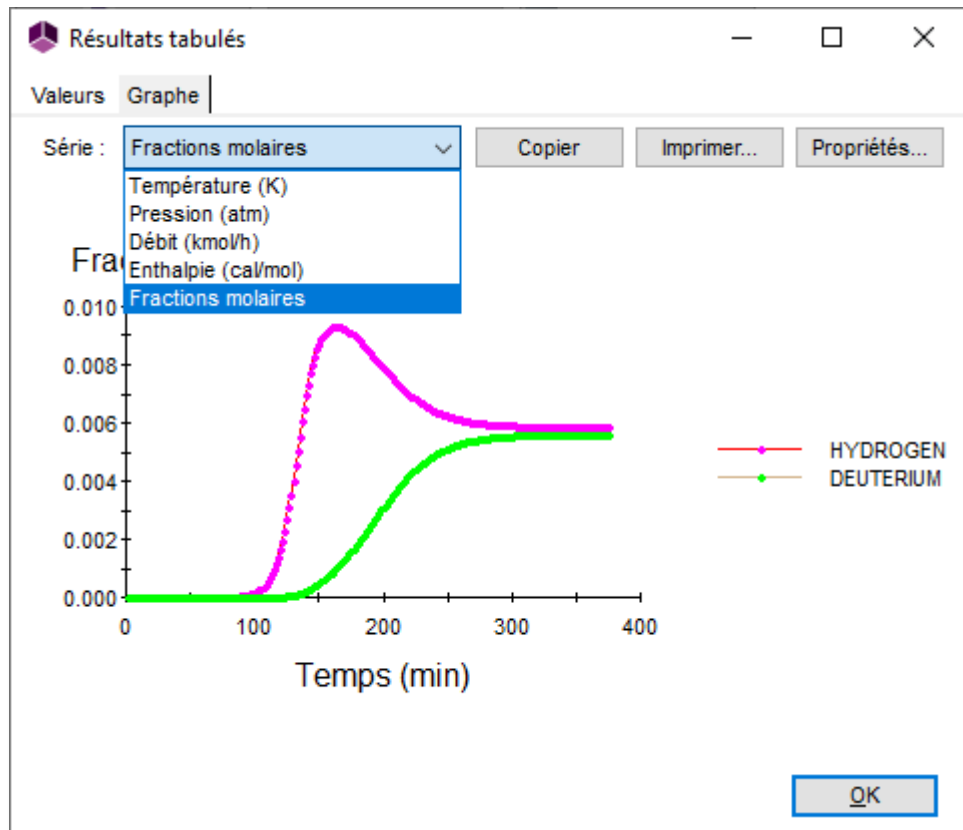
- ✓ « Première cellule » : Cellule de sortie de la colonne
- ✓ « Dernière cellule » : Cellule d'entrée de la colonne

La figure ci-dessous présente les courbes de percées de l'hydrogène et du deutérium obtenues par simulation et les données expérimentales de [NIS95]. La simulation permet de retrouver les valeurs de [NIS95] pour l'hydrogène à la fois en temps de percée et en concentration maximale. Le temps de percée du deutérium est un peu sous-estimé par la simulation. La simulation permet de bien représenter la compétition des deux constituants vis-à-vis des sites d'adsorption. Le pic de relargage de l'hydrogène sous l'effet de l'adsorption du deutérium est correctement reproduit.



### 2.3. Profils des courants de sortie

Les profils de température, pression, débit, enthalpie et compositions sont également disponibles pour chaque 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 d'un courant de sortie.



### 3. BIBLIOGRAPHIE

- [HOS21] HOSSAIN K., "Study on Hydrogen Isotopes Behavior in Proton Conducting Zirconates and Rare Earth Oxides", PhD Thesis, Kyushu University (2021)
- [MEY65] MYERS A.L., PRAUSNITZ J.M., "Thermodynamics of Mixed-Gas Adsorption", AIChE J., 11, 121-127 (1965)
- [NIS94] NISHIKAWA M., TANAKA K., UETAKE M., ENOEDA M., "Study on a Method to Recover Tritium from Blanket Sweep Gas", Fusion Technology, 26, 17-26 (1994)
- [NIS95] NISHIKAWA M., TANAKA K., UETAKE M., ENOEDA M., KAWAMURA Y., OKUNO K., "Adsorption Isotherm and Separation Factor for Multicomponent Hydrogen Isotopes in Cryosorption Method for Recovery of Tritium from Blanket Sweep Gas", Fusion Technology, 28, 711-716 (1995)
- [ROW24] 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 (2023)
- [WIL93] WILLMS R.S., "Cryogenic Adsorption of Low-Concentration Hydrogen on Charcoal, 5A Molecular Sieve, UOP S-115, ZSM-5 and Wessalith DAY", 15<sup>th</sup> IEEE Symp. Fusion Eng., 61-64 (1993)
- [WIL95] WILLMS R.S., TAYLOR D.J., ENOEDA M., OKUNO K., "Practical-Scale Tests of Cryogenic Molecular Sieve for Separating Low-Concentration Hydrogen Isotopes from Helium", Fusion Eng. Des., 28, 386-391 (1995)