

EXEMPLE D'APPLICATION PROSIM DAC

PROCEDE VTSA POUR L'ADSORPTION DIRECTE DU CO₂ DE L'AIR

INTERET DE L'EXEMPLE

Cet exemple traite d'un procédé VTSA (Vacuum Thermal Swing Adsorption) pour l'adsorption directe du CO₂ de l'air. Un modèle thermodynamique d'adsorption permettant de prendre en compte l'effet de l'humidité de l'air sur l'adsorption du CO₂ est utilisé. Ce procédé est modélisé dans *ProSim DAC*, le logiciel de simulation dynamique de Fives ProSim dédié aux colonnes d'adsorption gaz-solide.

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

FICHIER PROSIM DAC CORRESPONDANT

PSPDYN_EX_FR-DAC.pmp3

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 de simulation 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 simulation6

1.5.3. Colonne d'adsorption6

2. RESULTATS 19

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 23

3. BIBLIOGRAPHIE 24

1. MODELISATION DU PROCEDE

1.1. Présentation du procédé

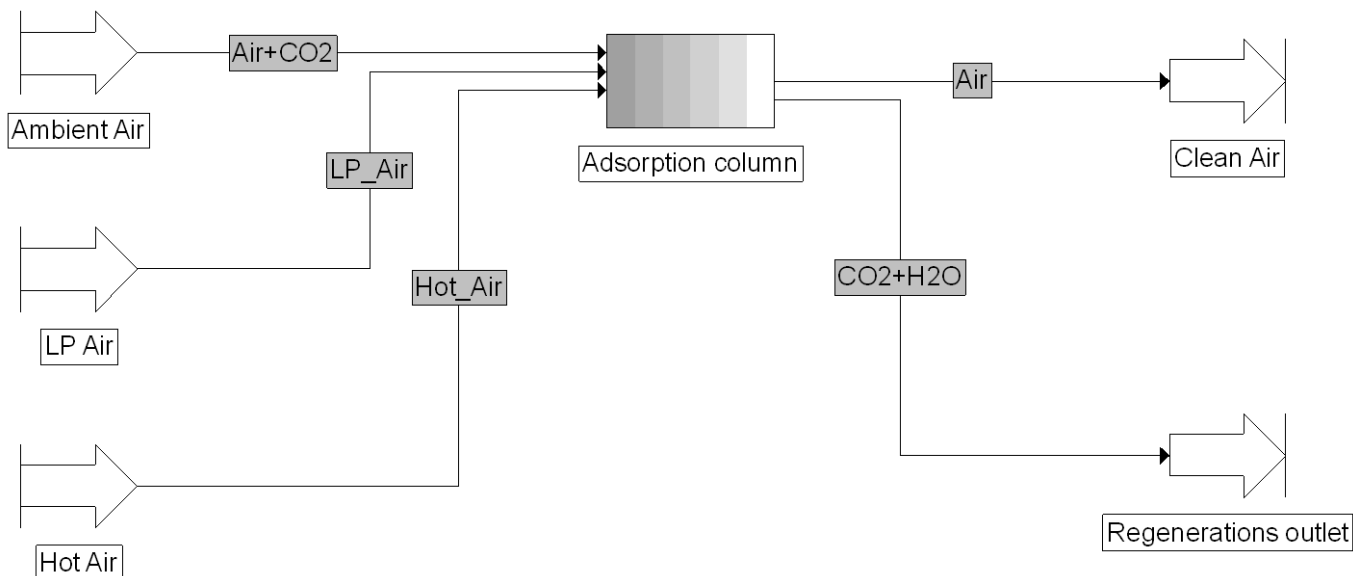
Le dioxyde de carbone (CO₂) est un composé courant dans l'air et aussi le composant le plus important des gaz à effet de serre [HAJ18b]. À l'heure actuelle, environ 44% du dioxyde de carbone provient de la combustion de combustibles fossiles tels que le pétrole, le charbon et le gaz naturel comprimé [ZHA13]. En 1958, la concentration de dioxyde de carbone dans l'environnement était d'environ 315 ppm. En 1986, elle avait atteint 350 ppm et en 2013, elle a dépassé 400 ppm. En outre, les émissions de dioxyde de carbone en 2040 devraient avoir augmenté de plus de 40% par rapport aux émissions de 2010 [WEB20].

De nombreuses techniques de capture du CO₂ de l'atmosphère, telles que la séparation membranaire, l'absorption chimique par divers solvants (liquides ioniques [RAZ16], nano-fluides [HAJ18a], solutions de sels d'acides aminés [SOR19], etc.), la séparation électrochimique, la séparation à basse température, l'adsorption solide et d'autres technologies de capture du carbone, ont été étudiées. La technologie d'adsorption solide est devenue l'une des méthodes les plus couramment utilisées pour la capture du CO₂ en raison du faible coût des adsorbants solides et de la faible consommation d'énergie dans le processus d'adsorption [WAL08]. Les procédés TSA (Temperature Swing Adsorption), PTSA (Pressure Temperature Swing Adsorption) et VTSA (Vacuum Temperature Swing Adsorption) sont les plus couramment rencontrés dans la littérature pour l'adsorption directe du CO₂ [JIA23].

Cet exemple est fondé sur la publication [BAL24]. Cette publication décrit l'adsorption dans une colonne de laboratoire d'air humide contenant du CO₂ sur un lit de APDES-NFC-FD-S qui est un chimisorbant fonctionnalisé par des amines (3-aminopropylmethyldiethoxysilane). *ProSim DAC* calcule automatiquement la quantité d'eau à ajouter à l'air pour respecter l'humidité relative spécifiée. Le procédé est un procédé VTSA (Vacuum Thermal Swing Adsorption). L'adsorption se fait à la pression atmosphérique. La courte régénération en pression (80 s) correspond à l'étape de mise au vide. Le lit est régénéré essentiellement lors de l'étape de régénération en température. Cette étape est à co-courant par rapport à l'adsorption. Le flux d'air à décarboner entre dans la colonne « Adsorption column » via le courant « Air+CO2 ». L'air chaud pour la régénération en température entre dans la colonne par le courant « Hot_Air ». Le courant « LP_Air » représente le balayage en air à basse pression après l'étape de dépressurisation. Il est obligatoire de mettre en place ce courant, même, si comme dans cette simulation, ce flux n'est pas utilisé dans les calculs. L'air décarboné quitte la colonne via le courant « Air ». Le flux de CO₂ et d'eau quittant la colonne lors de la régénération constitue le courant « CO2+H2O ».

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^{®1} 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
Air		
Dioxyde de carbone	CO ₂	124-38-9
Eau	H ₂ O	7732-18-5

1.4. Modèle thermodynamique

L'adsorption et les régénérations sont réalisées à des pressions égales ou inférieures à la pression atmosphérique et à des températures inférieures à 102°C. Le profil thermodynamique « Idéal » est ainsi sélectionné dans le calculator Simulis Thermodynamics.

¹ CAS Registry Numbers[®] 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[®] have not been verified by ACS and may be inaccurate.

1.5. Paramètres opératoires

1.5.1. Alimentations du procédé

Les caractéristiques des trois alimentations du procédé sont décrites dans le tableau ci-dessous.

	Ambient Air	LP Air	Hot Air
Température (°C)	20	20	120
Pression (bar)	1.01325	0.050	0.050
Débit total (cm ³ /s)	50	25	25
Humidité relative (%)	49.82	0	0
Fractions molaires			
Air	0.999595	1	1
Dioxyde de carbone	0.000405	0	0
Eau	0*	0	0

* La teneur en eau nécessaire pour obtenir l'humidité relative spécifiée va être automatiquement calculée par le module « Alimentation » correspondant.

La copie d'écran ci-dessous montre la configuration de l'alimentation « Ambient Air ».

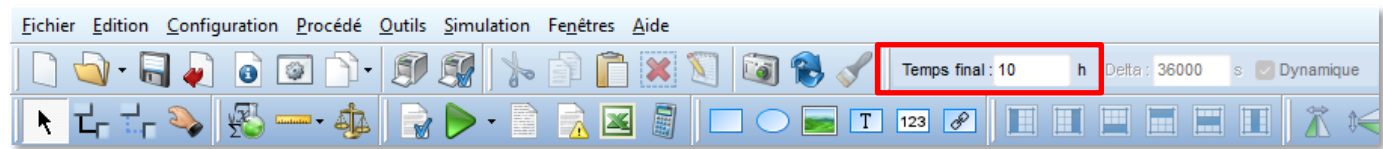
The screenshot shows the 'Alimentation (\$ALIM)' window with the following configuration:

- Nom: Ambient Air
- Desc : (empty)
- Identification | Paramètres | Scripts | Rapport | Courants | Notes | Paramètre: ◀ ▶
- Copier | Coller | ☐ Données tabulées...
- Débits et fractions | Température et Pression
- Spécification pour le débit: Fractions molaires
- Fractions molaires table:

#	Constituants	Fractions molaires
1	AIR	0,999595
2	CARBON DIOXIDE	0,000405
3	WATER	0
- Somme : 1,0000 | 1 - somme : 0,0000
- Débit Total: Débit volumique
- Débit volumique total: 50 cm3/s
- Humidité: Relative
- Humidité relative: 49,82 %
- Liaison : (empty) ...
- OK | Annuler

1.5.2. Durée de simulation

Le « Temps final » est la durée opératoire réelle de l'opération (adsorption + régénération sous vide + régénération en température dans cet exemple). Le « Temps final » est renseigné au niveau des barres d'icônes de *ProSim DAC* :



Durée de simulation	Valeur
Temps final	10 h

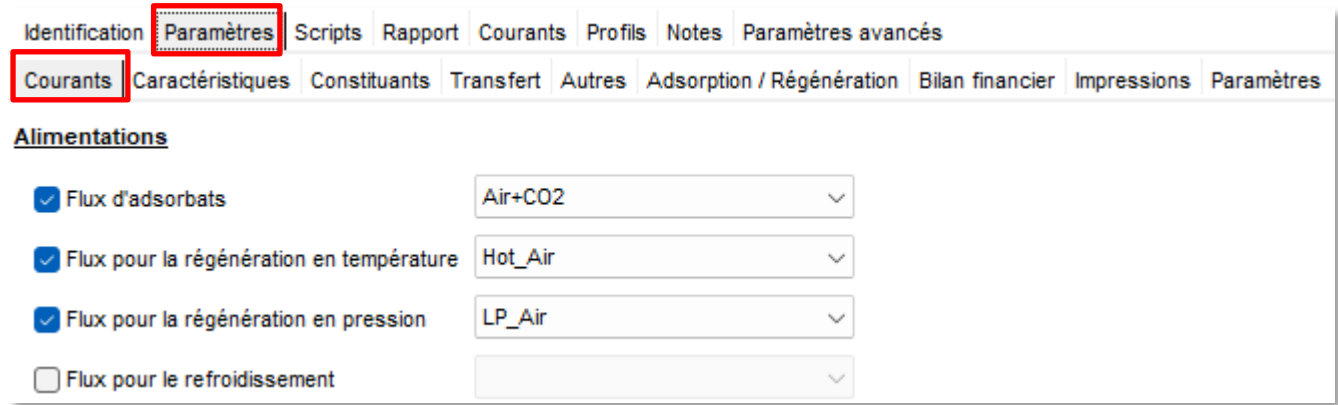
1.5.3. Colonne d'adsorption

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 (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

Les trois 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 les étapes de régénération

La copie d'écran ci-dessous montre les sorties utilisées.

Sorties

☒ Etapes d'adsorption	Air
☒ Etapes de régénération	CO2+H2O

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.

Diamètre du lit (D) m

Longueur du lit (L) m

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 des étapes de régénération. La température de la paroi lors de l'étape d'adsorption est spécifiée ultérieurement.

Comportement thermique	
Transfert thermique	Q donnée et transfert à la paroi
Température de la paroi	120°C

1.5.3.5. Caractéristique du lit d'adsorbant

Caractéristique du lit d'adsorbant	
Degré de vide du lit	0.092 m ³ /m ³

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.

Caractéristiques des particules	
Diamètre	7,5 mm
Masse volumique	61 kg/m ³
Chaleur spécifique	2 070 J/kg/K
Rapport surface/volume	800 m ² /m ³

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 à la température de fin de régénération en température et à la composition de l'air à épurer.

Initialisation	Valeur
Type	Fournie par l'utilisateur
Pression	1 atm
Température	120°C
Factions molaires	
Air	0.9881
Dioxyde de carbone	0.0004
Eau	0.0115

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 ».

Identification
Paramètres
Scripts
Rapport
Courants
Profils
Notes
Paramètres avancés

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

Colonne

Type de colonne

Colonne à flux longitudinal

Editer...

Transfert thermique

Q donnée et transfert à la paroi

Température de la paroi

120

°C

Adsorbant

Charger...

Degré de vide du lit

0,092

m³/m³

Diamètre des particules

0,0075

m

Densité des particules

61

kg/m3

Chaleur spécifique du solide

2070

J/kg/K

Rapport surface/volume

800

m²/m³

Conditions (T,P) des mesures

Conditions

Normales

Initialisation

Type d'initialisation

fournie par l'utilisateur

Pression initiale

1

atm

Température initiale

120

°C

Factions molaires initiales

1	AIR	0,9881
2	CARBON DIOXIDE	0,0004
3	WATER	0,0115

Somme

1,0000

1.5.3.9. Isotherme d'adsorption

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

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

K₀ (mol/kg/atm)	0
K₁ (K)	0
ΔH_{ads} (J/mol)	0

L'isotherme de Toth généralisée a été choisie pour le dioxyde de carbone :

$$q_i = \frac{q_s b P_i}{[K + (b P_i)^\omega]^{1/\omega}}$$

$$q_s = q_{s,0} \exp\left[\chi\left(1 - \frac{T}{T_0}\right)\right] \quad b = b_0 \exp\left[-\frac{\Delta H_a}{RT_0}\left(\frac{T_0}{T} - 1\right)\right] \quad \omega = \omega_0 + \alpha\left(1 - \frac{T}{T_0}\right)$$

q_{s0} (mol/kg)	2.2
b₀ (atm⁻¹)	37 794.225
ω₀ (-)	0.4247
χ (-)	0
ΔH_a (J/mol)	-60 000
α (-)	-0.4921
T₀ (K)	296
K (-)	1
ΔH_{ads} (J/mol)	-60 000

L'isotherme de GAB (Guggenheim - Anderson - de Boer) a été choisie pour l'eau :

$$q_i = \frac{C_m C_G K_{ads} \frac{P_i}{P_i^{sat}}}{\left(1 - K_{ads} \frac{P_i}{P_i^{sat}}\right) \left(1 + (C_G - 1) K_{ads} \frac{P_i}{P_i^{sat}}\right)}$$

$$C_m = C_{m0} \exp\left(\frac{\beta}{T}\right) \quad C_G = C_{G0} \exp\left(\frac{\Delta H_C}{RT}\right) \quad K_{ads} = K_{ads0} \exp\left(\frac{\Delta H_K}{RT}\right)$$

C_{m0} (mol/kg)	36.48
C_{G0} (-)	0.1489
K_{ads} (-)	0.5751
β (K)	0
ΔH_C (J/mol)	0
ΔH_K (J/mol)	0
ΔH_{ads} (J/mol)	-43 800

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

AIR
CARBON DIOXIDE
WATER

Enthalpie d'adsorption

Enthalpie d'adsorption Fourni

Chaleur d'adsorption 0 cal/mol Charger...

Isotherme d'adsorption

Corrélation Isotherme linéaire

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

K0 0 mol/kg/atm

K1 0 K

AIR
CARBON DIOXIDE
WATER

Enthalpie d'adsorption

Enthalpie d'adsorption Fourni

Chaleur d'adsorption -60000 J/mol Charger...

Isotherme d'adsorption

Corrélation Toth généralisé

$$q_i = \frac{q_{s0} \exp\left[\chi \left(1 - \frac{T}{T_0}\right)\right] b_0 \exp\left[-\frac{\Delta H_a}{RT_0} \left(\frac{T_0}{T} - 1\right)\right] P_i}{\left[K + \left(b_0 \exp\left[-\frac{\Delta H_a}{RT_0} \left(\frac{T_0}{T} - 1\right)\right] P_i\right)^{\omega_0 + \alpha \left(1 - \frac{T}{T_0}\right)}\right]^{\frac{1}{\omega_0 + \alpha \left(1 - \frac{T}{T_0}\right)}}$$

qs0 2,2 mol/kg ΔHa -60000 J/mol

b0 37794,225 atm^α α -0,4921

w0 0,4247 T0 296 K

X 0 K 1

AIR
CARBON DIOXIDE
WATER

Enthalpie d'adsorption

Enthalpie d'adsorption Fourni

Chaleur d'adsorption -43800 J/mol Charger...

Isotherme d'adsorption

Corrélation GAB (Guggenheim - Anderson - de Boer)

$$q_i = \frac{C_{m0} \exp\left(\frac{\beta}{T}\right) C_{G0} \exp\left(\frac{\Delta H_c}{RT}\right) K_{ads0} \exp\left(\frac{\Delta H_k}{RT}\right) \frac{P_i}{P_{sat}}}{\left(1 - K_{ads0} \exp\left(\frac{\Delta H_k}{RT}\right) \frac{P_i}{P_{sat}}\right) \left(1 + \left(C_{G0} \exp\left(\frac{\Delta H_c}{RT}\right) - 1\right) K_{ads0} \exp\left(\frac{\Delta H_k}{RT}\right) \frac{P_i}{P_{sat}}\right)}$$

Cm0 36,48 mol/kg ΔHc 0 J/mol

CG0 0,1489 ΔHk 0 J/mol

Kads0 0,5751

β 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
Transfert de matière	
Type	Transfert gaz et solide
Transfert de matière phase gaz	
Type	Pas de résistance
Transfert de matière phase solide	
Type	kf fourni
Air	0 s ⁻¹
Dioxyde de carbone	0.0002 s ⁻¹
Eau	0.001 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 ou fournis, comme dans cet exemple. La valeur pour le transfert gaz – adsorbant est due au fait que ce transfert ne doit pas être limitant dans cet exemple.

Transfert thermique	Valeur
Bilans enthalpiques	Pris en compte
Gaz – Adsorbant	1 000 000 W/m ² /K
Gaz – Paroi	3 W/m ² /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 ».

Identification

Paramètres

Scripts

Rapport

Courants

Profils

Notes

Paramètres avancés

Courants

Caractéristiques

Constituants

Transfert

Autres

Adsorption / Régénération

Bilan financier

Impressions

Paramètres

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⁻¹)

1	AIR	0
2	CARBON DIOXIDE	0,0002
3	WATER	0,001

Transfert thermique

☒ Bilans enthalpiques ?

Gaz-adsorbant

Fournie

Coefficient d'échange

1000000

W/m2/K

Gaz-paroi

Fournie

Coefficient d'échange

3

W/m2/K

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

4,0000009560229

kcal/h/m2/K

1.5.3.12. Modèle thermodynamique d'adsorption

Pour cet exemple, le modèle thermodynamique d'adsorption de Stampi – Bombelli est utilisé. Il permet de prendre en compte l'effet positif de l'humidité du courant sur l'adsorption du dioxyde de carbone. Ce modèle est plus particulièrement développé pour corriger deux des paramètres de l'isotherme de Toth généralisée par une fonction de la quantité adsorbée d'eau.

$$q_{s,wet} = q_s \left(\frac{1}{1 - \Psi q_{H_2O}} \right)$$

$$b_{wet} = b(1 + \beta q_{H_2O})$$

Adsorbant principal	Dioxyde de carbone
Co-adsorbant	Eau
ψ (kg/mol)	0.00958
β (kg/mol)	3.448

Identification
Paramètres
Scripts
Rapport
Courants
Profils
Notes
Paramètres avancés

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

Vanne

☐ Présence d'une vanne en sortie

Etat au démarrage
Ouvrir

Pression à l'ouverture
0
atm

Coefficient de l'équation
1E-6

Colonne

Pression de sortie
1
atm

Thermodynamique

Modèle d'adsorption
Stampi - Bombelli

Adsorbant principal
CARBON DIOXIDE

Co-adsorbant
WATER

ψ (Psi)
0,00958
kg/mol

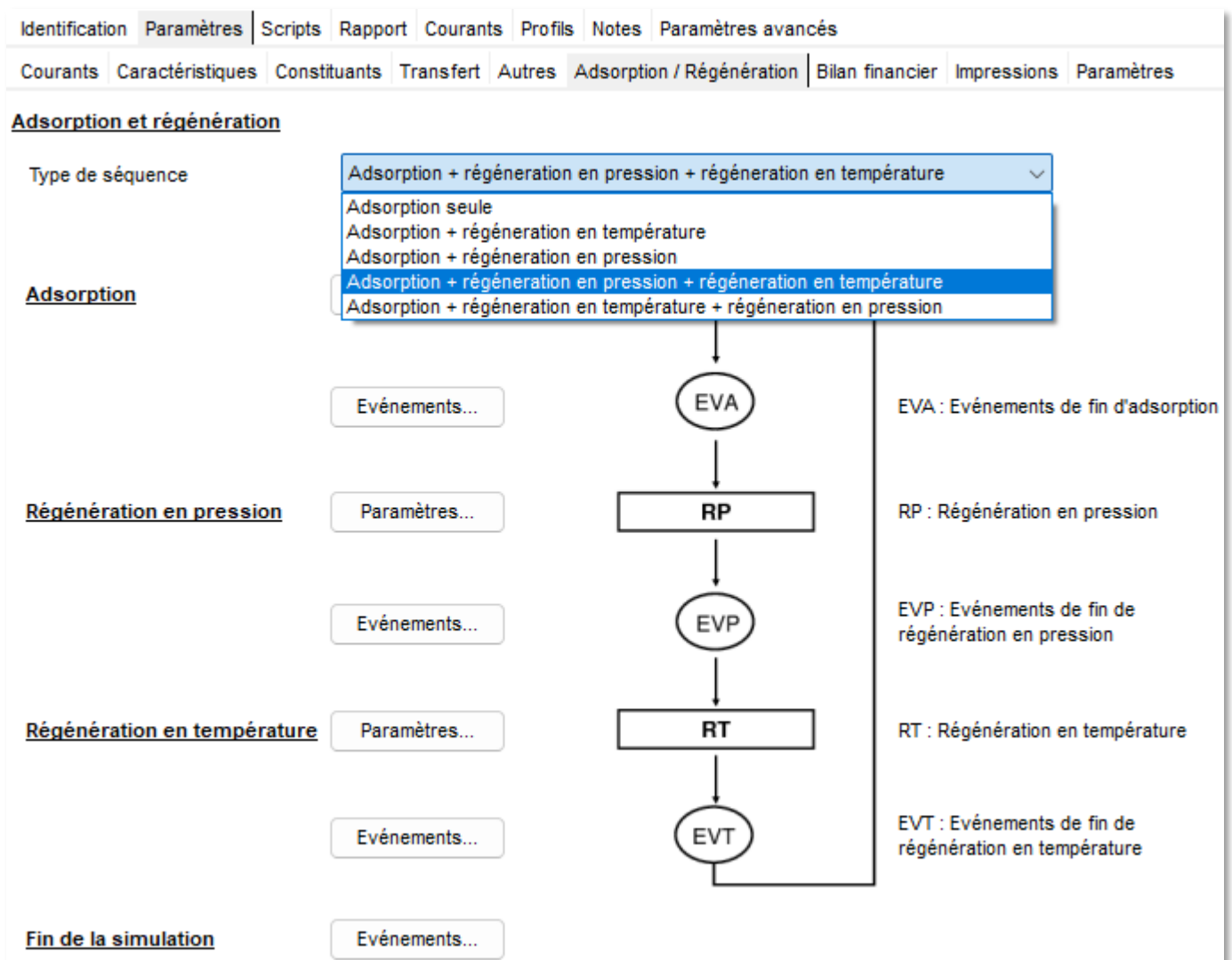
β (Beta)
3,448
kg/mol

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



Les paramètres de l'étape d'adsorption sont :

Adsorption	
Refroidissement de la colonne par la paroi	Oui
Température de la paroi	20°C
Autres paramètres	Valeur par défaut
Evénement	Durée = 13 772 s

Les paramètres de l'étape de régénération en pression sont :

Régénération en pression	
Pression à atteindre	50 mbar
Durée de la rampe de pression descendante	80 s
Durée de la rampe de pression montante	0 s
Coefficient de la vanne	10 ⁻⁶
Autres paramètres	Valeur par défaut
Evénement	Durée = 80 s

Les paramètres de l'étape de régénération en température sont :

Régénération en température	
Type de régénération	Co-courant
Autres paramètres	Valeur par défaut
Evénement	Durée = 22 148 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 = 10 s
Impression du courant de sortie avec le pas de temps du module	Oui
Impression des données d'entrée	Oui
Type de résultats	Molaire
Autres paramètres	Valeur par défaut

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

The screenshot displays the 'Paramètres' (Parameters) window with the 'Impressions' (Prints) sub-tab selected. The interface includes a top navigation bar with tabs: Identification, Paramètres, Scripts, Rapport, Courants, Profils, Notes, and Paramètres avancés. Below this, a secondary bar shows: Courants, Caractéristiques, Constituants, Transfert, Autres, Adsorption / Régénération, Bilan financier, Impressions (highlighted), and Paramètres. The main area is titled 'Imprimer' (Print) and contains several settings:

- ☒ Imprimer les fichiers résultats: A sub-section with 'Fréquence' set to 10 and unit 's'.
- ☐ Imprimer les courbes 3D: A sub-section with 'Fréquence' set to 0,1 and unit 'h'.
- ☒ Impression du courant de sortie avec le pas de temps du module
- ☒ Impression des données d'entrée
- Type de résultats: A dropdown menu set to 'Molaire'.
- ☐ Détection des inertes: A sub-section with 'Seuil' (Threshold) set to 1E-6 and unit '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 15 cellules afin d'obtenir une résolution « fine » du problème.

Paramètres du modèle	Valeur
Nombre de cellules de discrétisation	15
Transfert solide lors de la régénération	Fourni
Coefficient de transfert de matière en phase solide (régénération)	
Air	0 s ⁻¹
Dioxyde de carbone	0.0002 s ⁻¹
Eau	0.002 s ⁻¹
Autres paramètres	
Valeur 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

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

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

▼

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

Paramètres du modèle

Nombre de cellules de discrétisation

15

Coefficient de dispersion axiale

0

m²/s

ΔH_{Régénération} / ΔH_{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 (régénération)

Fourni

▼

Coefficients de transfert de matière phase solide - régénération (s-1)

1	AIR	0
2	CARBON DIOXIDE	0,0002
3	WATER	0,002

Tolérances (regénération)

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 d'un peu moins de 3 g.

CARACTERISTIQUES GENERALES DE LA COLONNE

Masse d'adsorbant dans la colonne :	2.78410	(g)
Volume de la colonne	: 50.2655	(cm3)
Volume de solide	: 45.6411	(cm3)
Volume de vide	: 4.62442	(cm3)

Avec les paramètres opératoires sélectionnés (voir § 1.5.3. entre-autre), le lit d'adsorbant est régénéré à 98%.

QUANTITE ADSORBEE (mol)

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

CONSTITUANT	Cycle N° 1
AIR	4.807498E-05
CARBON DIOXIDE	4.620825E-03
WATER	7.976939E-03

QUANTITE RECUPEREE DURANT LA REGENERATION EN TEMPERATURE (mol)

CONSTITUANT	Cycle N° 1
AIR	0.846638
CARBON DIOXIDE	4.543218E-03
WATER	7.733148E-03

2.2. Profils de la colonne d'adsorption

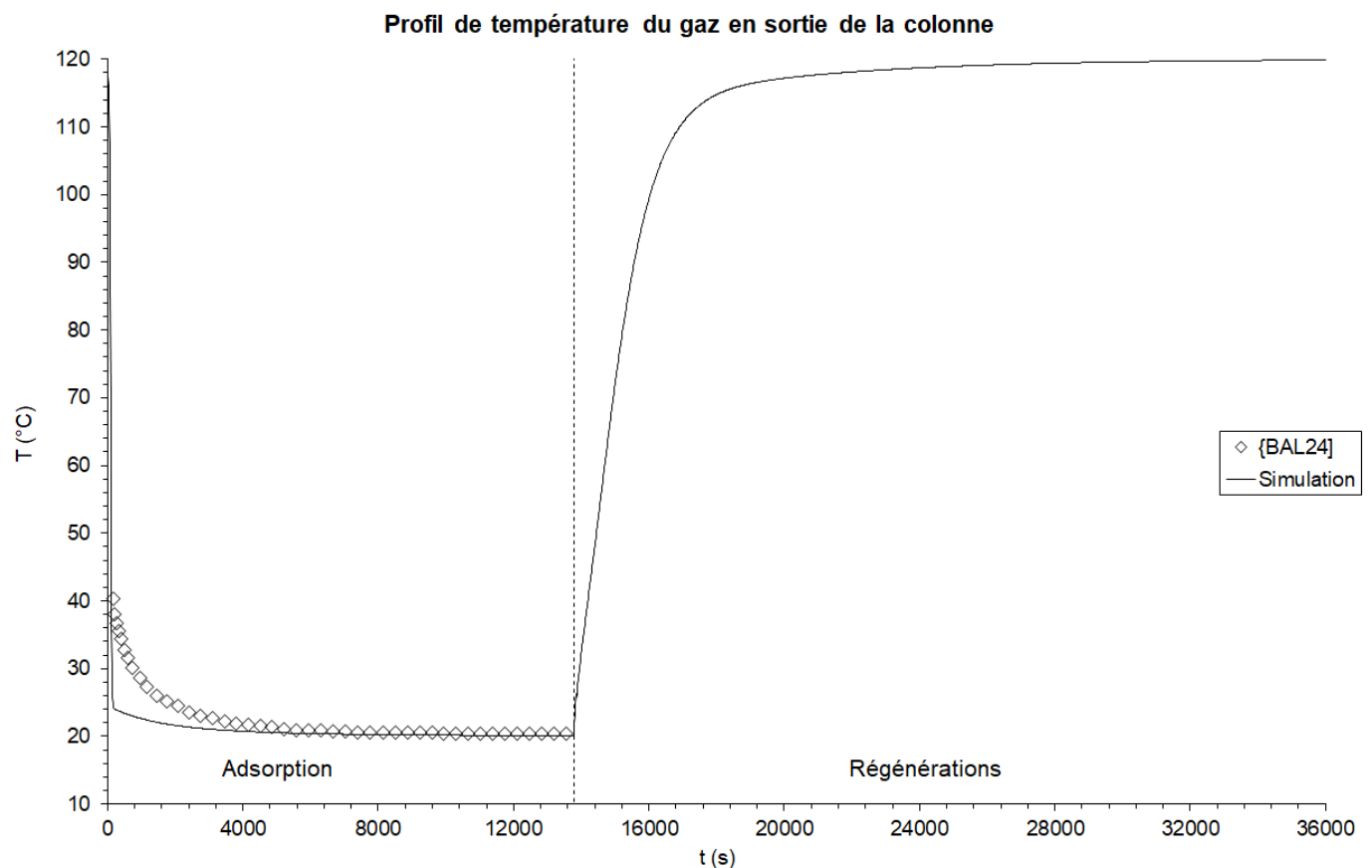
Plusieurs profils (températures, pressions, vitesses, concentrations, fractions molaire ou massique et courbes de percée) dans la colonne d'adsorption sont disponibles à la fin de la simulation dans la fenêtre d'édition (onglet « Profils »). Ces profils comportent deux courbes :

- ✓ « 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

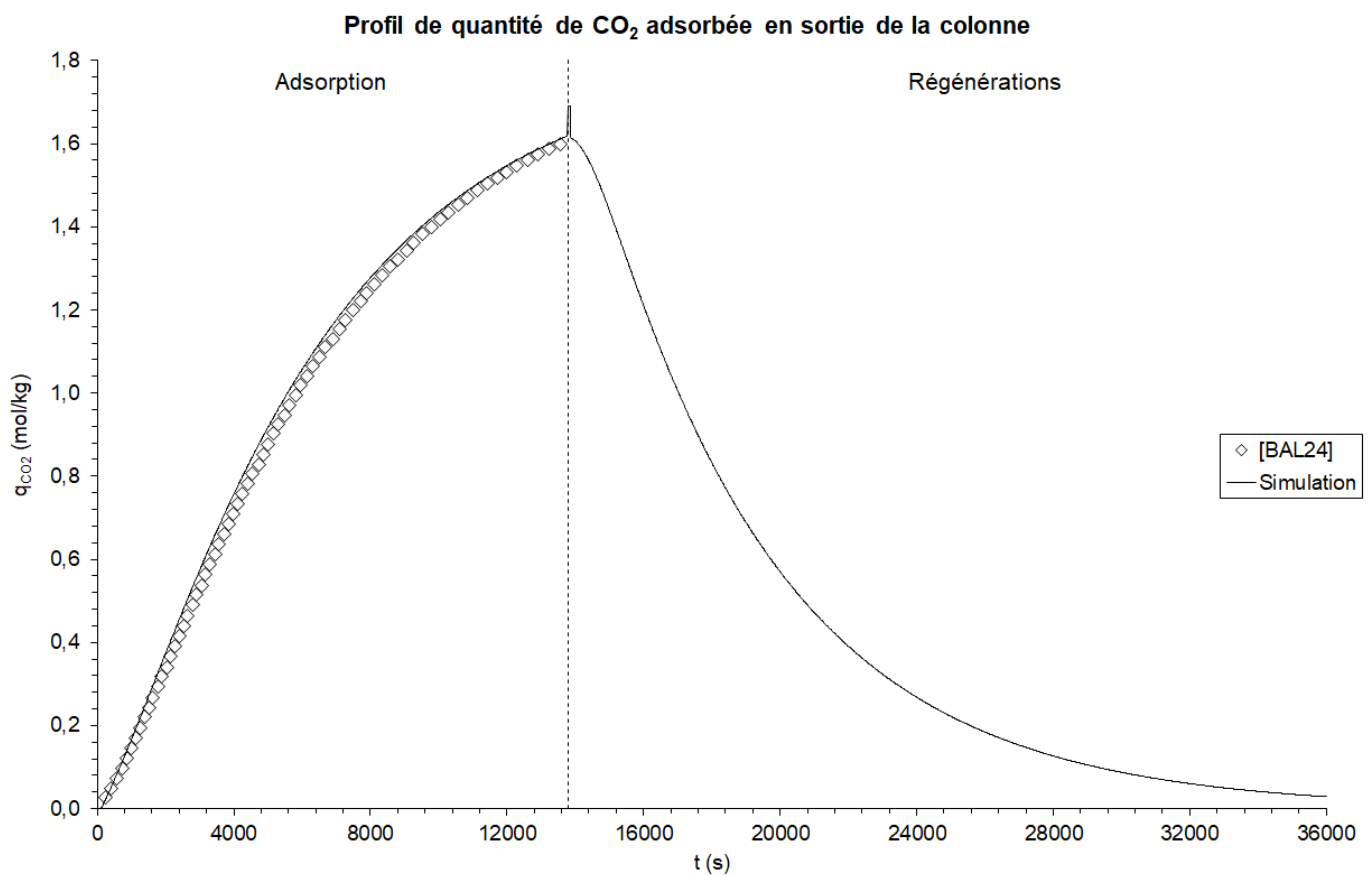
Si une régénération a lieu à contre-courant :

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

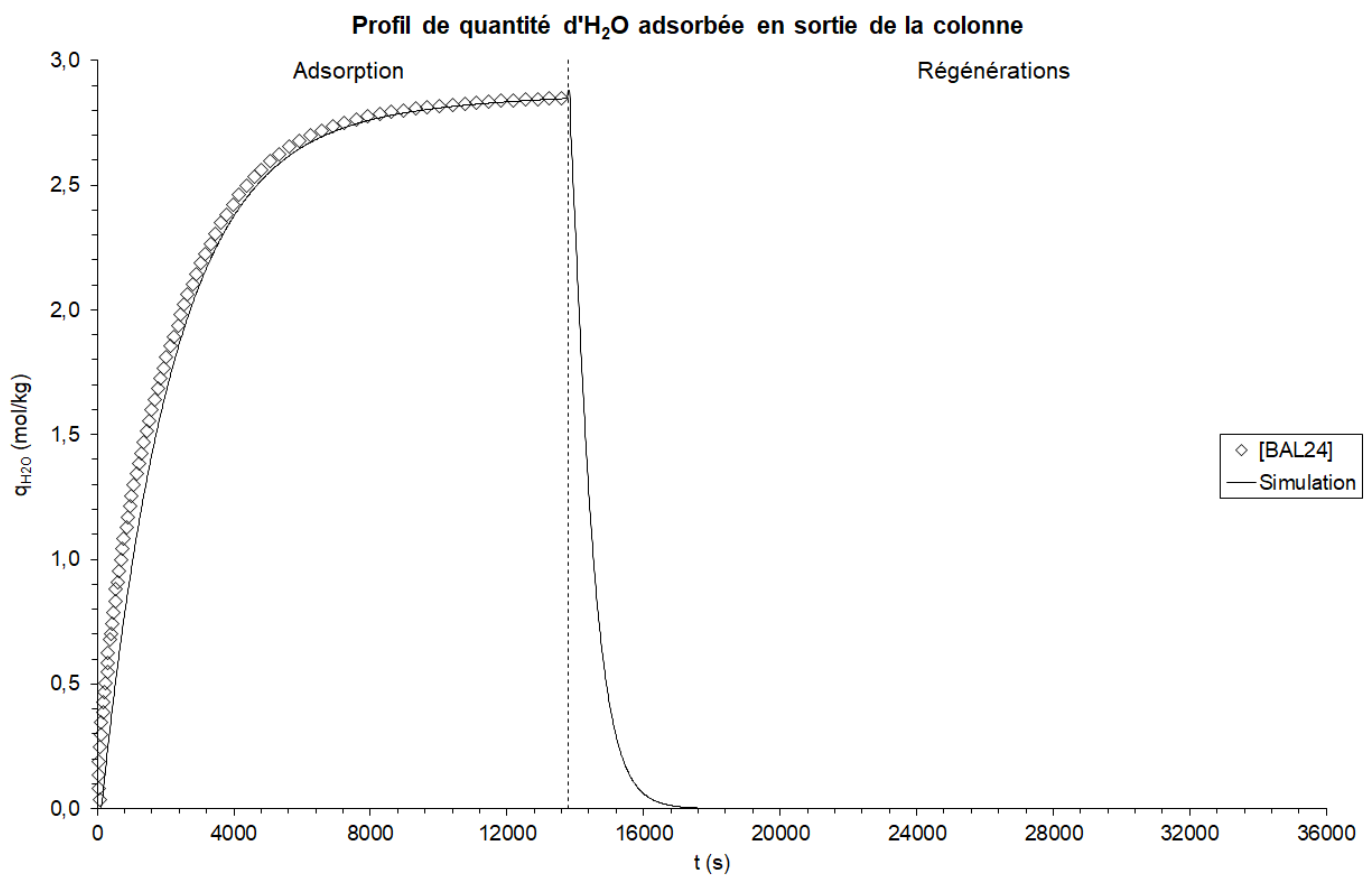
La figure ci-dessous présente l'évolution au cours du temps de la température du gaz en sortie de la colonne. Une comparaison avec les résultats de [BAL24] est faite pour l'étape d'adsorption (les courbes publiées par [BAL24] utilisent un autre type de régénération que celle de cette simulation). Au démarrage de la simulation la température chute rapidement de la température initiale de 120°C à la température de la paroi spécifiée pour cette étape (20°C). La prise en compte de l'inertie thermique dans la simulation induirait un profil moins abrupt au début de l'étape d'adsorption et correspondant à celui de [BAL24]. L'étape de régénération en pression étant très courte (80 s) elle n'est quasiment pas visible sur ce profil. Lors de l'étape de régénération en température la remontée en température est graduelle avec l'alimentation en inerte chaud (120°C).



La figure ci-dessous présente l'évolution au cours du temps de la quantité de CO₂ adsorbée en sortie de la colonne. Une comparaison avec les résultats de [BAL24] est faite pour l'étape d'adsorption (les courbes publiées par [BAL24] utilisent un autre type de régénération que celle de cette simulation). Le CO₂ s'adsorbe régulièrement lors de l'étape d'adsorption. Cette étape est arrêtée quand la saturation du lit en CO₂ est presque atteinte. La simulation permet de retrouver des résultats analogues à ceux de [BAL24] pour cette étape. La courte régénération en pression se traduit par un pic d'adsorption de CO₂. Le lit est régénéré graduellement durant la régénération en température. La simulation est arrêtée lorsque le lit est presque complètement régénéré.

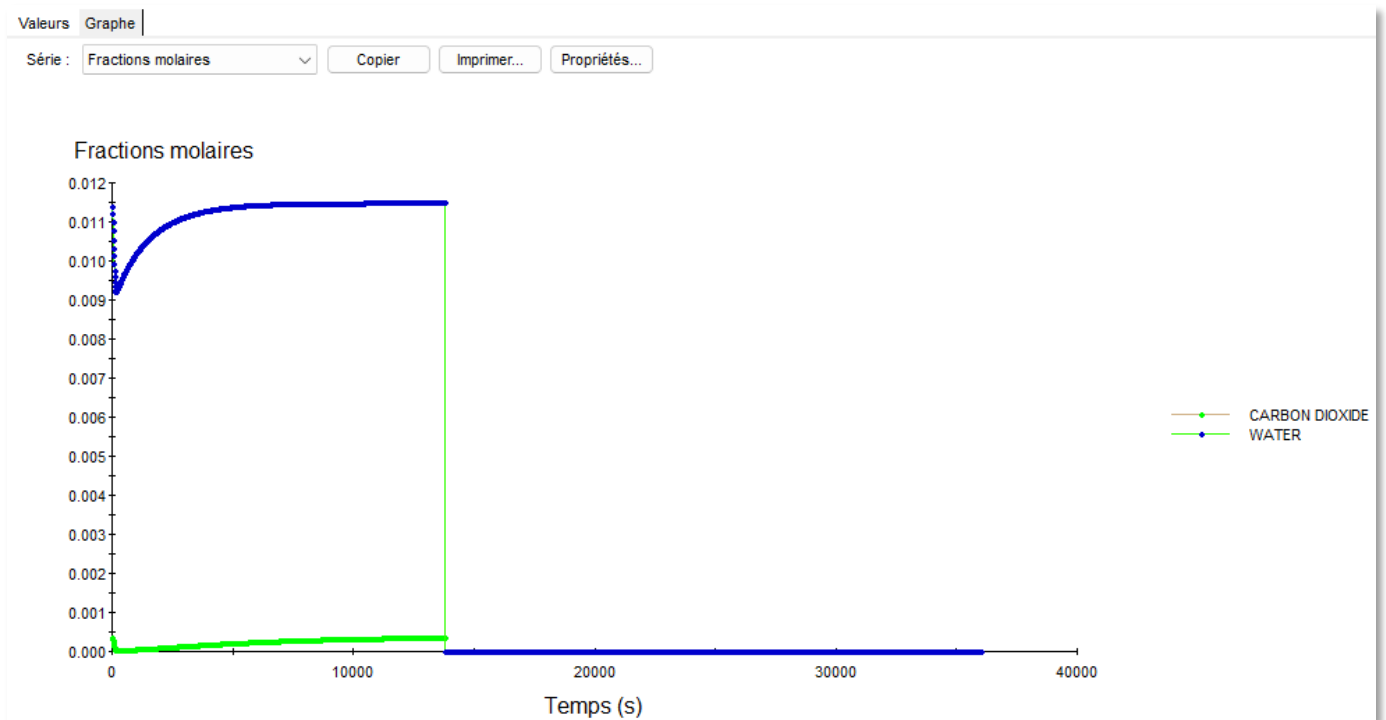


La figure ci-dessous présente l'évolution au cours du temps de la quantité d'eau adsorbée en sortie de la colonne. Une comparaison avec les résultats de [BAL24] est faite pour l'étape d'adsorption (les courbes publiées par [BAL24] utilisent un autre type de régénération que celle de cette simulation). L'eau s'adsorbe régulièrement lors de l'étape d'adsorption. A l'arrêt de cette étape le lit est saturé en eau. La simulation permet de retrouver des résultats analogues à ceux de [BAL24] pour cette étape. La courte régénération en pression se traduit par un pic d'adsorption d'eau. Lors de la régénération en température le lit se régénère rapidement. A la fin de cette étape l'adsorbant est sec.



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

- [BAL24] BALASUBRAMANIAM B.M., THIERRY P.-T., LETHIER S., PUGNET V., LLEWELLYN P., RAJENDRAN A., "Process-Performance of Solid Sorbents for Direct Air Capture (DAC) of CO₂ in Optimized Temperature-Vacuum Swing Adsorption (TVSA) Cycles", Chem. Eng. J., 485, 149568 (2024)
- [HAJ18a] HAJILARY N., REZAKAZEMI M., "CFD Modeling of CO₂ Capture by Water-Based Nanofluids using Hollow Fiber Membrane Contactor", Int. J. Greenhouse Gas Control, 77, 88-95 (2018)
- [HAJ18b] HAJILARY N., SHAHI A., REZAKAZEMI M., "Evaluation of Socio-Economic Factors on CO₂ Emissions in Iran: Factorial Design and Multivariable Methods", J. Clean. Prod. 189, 108-115 (2018)
- [JIA23] JIANG L., LIU W., WANG R.Q., GONZALEZ-DIAZ A., ROJAS-MICHAGA M.F., MICHAÏLOS S., POURKASHANIAN M., ZHANG X.J., FONT-PALMA C., "Sorption Direct Air Capture with CO₂ Utilization", Progress Energy Combustion Sci., 95, 101069 (2023)
- [RAZ16] RAZAVI S.M.R., REZAKAZEMI M., ALBADARIN A.B., SHIRAZIAN S., "Simulation of CO₂ Absorption by Solution of Ammonium Ionic Liquid in Hollow-Fiber Contactors", Chem. Eng. Process., 108, 27-34 (2016)
- [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)
- [SOR19] SOROUSH E., MESBAH M., HAJILARY N., REZAKAZEMI M., "ANFIS Modeling for Prediction of CO₂ Solubility in Potassium and Sodium based Amino Acid Salt Solutions", J. Environ. Chem. Eng., 7, 102925 (2019)
- [WAL08] WALTON K.S., MILLWARD A.R., DUBBELDAM D., FROST H., LOW J.J., YAGHI O.M., SNURR R.Q., "Understanding Inflections and Steps in Carbon Dioxide Adsorption Isotherms in Metal-Organic Frameworks", J. Am. Chem. Soc., 130, 406-407 (2008)
- [WEB20] WEBER P., LOVELL H., ANDREASSEN L.M., BOSTON C., "Reconstructing the Little Ice Age Extent of Langfjordjøkelen, Arctic Mainland Norway, as a Baseline for Assessing Acentennial-Scale icefield Recession", Polar Res., 39 4304 (2020)
- [ZHA13] ZHANG Z., ZHAO Y., GONG Q., LI Z., LI J., "MOFs for CO₂ Capture and Separation from Flue Gas Mixtures: The Effect of Multifunctional Sites on their Adsorption Capacity and Selectivity", Chem. Commun. 49, 653-661 (2013)