

## Annexe 1 – Modèles d'isothermes d'équilibre solide – fluide

Modèle Isotherme	Type d'isotherme	Expression	Dépendance à la température	Commentaires
Langmuir	Monocouche Type I	$q = q_m \frac{b_l C}{1 + b_l C}$	$b_l = b_l^0 \exp\left(\frac{E}{RT}\right)$	Loi de Henry respectée et limite finie
Freundlich	-	$q = K(P_v)^m$		Loi de Henry non respectée Pas de limite de saturation
Sips	Type I	$q = \frac{q_m (b_s P_v)^m}{1 + (b_s P_v)^m}$	$b_s = b_s^0 \exp\left(\frac{E}{RT}\right)$	Loi de Henry respectée Limite finie
DR	Remplissage volumique Type I	$q = q_m \exp\left(-b_d \frac{A^2}{\beta^2}\right)$ $A = RT \ln\left(\frac{P_s}{P}\right)$		Loi de Henry non respectée Limite finie
DA	Remplissage volumique Type I	$q = q_m \exp\left(-b_d \frac{A^m}{\beta^m}\right)$ $A = RT \ln\left(\frac{P_s}{P}\right)$		Loi de Henry non respectée Limite finie
BET	Multicouche Type II et III	$\frac{1}{q[(P_s/P_v) - 1]} = \frac{c - 1}{q_m c} \left(\frac{P_v}{P_s}\right) + \frac{1}{q_m c}$	$c = c^0 \exp\left(\frac{E}{RT}\right)$	Loi de Henry respectée Pas de limite finie
BET modifié	Multicouche Type II et III	$q = \frac{q_m c_{BET} P_v}{(1 - P_v/P_s)} \times \frac{1 - (m + 1)(P_v/P_s)^m + m(P_v/P_s)^{m+1}}{1 - (P_v/P_s) + c_{BET} P_v [1 - (P_v/P_s)^m]}$	$c_{BET} = c_{BET}^0 \exp\left(\frac{E}{RT}\right)$	Loi de Henry respectée Limite finie

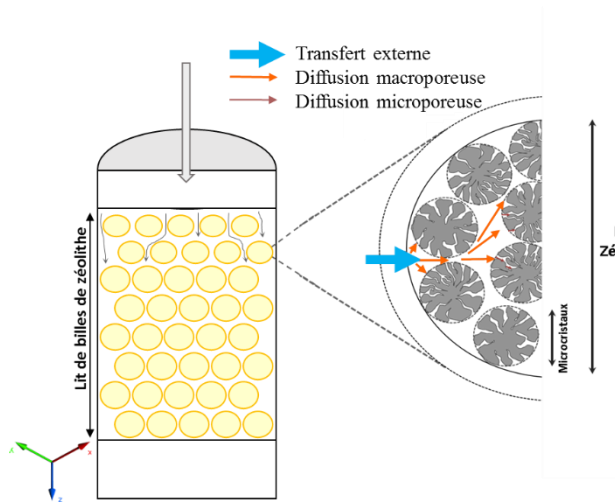
## Annexe 2 – Modélisation d'une courbe de percée

### Description du système modélisé

1. Modélisation du transfert de matière d'une phase fluide vers un adsorbant ;
2. Adsorbant mis en œuvre sous forme de lit fixe.

### Hypothèses

1. Problème unidimensionnelle suivant l'axe  $Oz$  ;
2. Adsorption isotherme ;
3. Pertes de charge à travers le lit d'adsorbant sont négligées ;
4. Adsorption de composés dilués dans un fluide : pas de variation de débit massique.



### Bilan matière

$$\varepsilon_\ell \frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial z} - D_{ax} \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} = (1 - \varepsilon_\ell) a_g \varphi$$

Avec  $u$  vitesse interstitielle :  $u = \frac{\tau_\ell}{\varepsilon_\ell \Omega} Q$

### Terme puits

#### Transfert externe

$$a_g \varphi = -k_e a_g (C - C|_{R_p})$$

et

$$a_g \varphi = -k_e \frac{3}{R_p} (C - C|_{r_m=R_p}) = \frac{3}{R_p} \varepsilon_m D_{eff} \left. \frac{\partial C}{\partial r_m} \right|_{r_m=R_p}$$

#### Transfert dans macroporosité

Le bilan dans la phase gaz et dans la macroporosité

$$\frac{\partial C_M}{\partial t} - \frac{1}{r_m^2} \frac{\partial}{\partial r_m} \left( r_m^2 D_{eff} \frac{\partial C_M}{\partial r_m} \right) = - \frac{(1 - \varepsilon_m)}{\varepsilon_m} \rho_s \frac{dw}{dt}$$

#### Transfert dans microporosité

$$\frac{\partial q}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 D_\mu \frac{\partial q}{\partial r} \right)$$

### Modèle Linear Driving force (LDF)

Conductance global (résistance externe – macro – microporeuse), équilibre linéaire (type Henry) :

$$\frac{1}{K'} = \frac{R_p}{3\varepsilon_m k_{ext}} + \frac{R_p^2}{15\varepsilon_m D_{eff}} + \frac{r_c^2}{15D_\mu}$$

Flux (transfert externe ou macroporosité)

$$(1 - \varepsilon_\ell) a_g \varphi = -(1 - \varepsilon_\ell) K (C - \bar{C})$$

Flux (transfert microporeux uniquement)

$$\frac{d\bar{q}}{dt} = \frac{15D_\mu}{r_c^2} (q^* - \bar{q})$$

### **Annexe 3 – Temps caractéristiques**

---

D'après Sun and Meunier, 2003 et Brosillon et al., 2001<sup>1</sup>

#### **Temps caractéristique des transferts externes**

$$t_e = \frac{R_p}{3\varepsilon_m k_{ext}}$$

avec

$$Sh = \frac{k_{ext} R_p}{2D_m}$$

$$Re = \frac{\rho u}{\mu}$$

$$Sc = \frac{\mu}{D_m \rho}$$

et (Wakao and Funazkri, 1978<sup>2</sup>)

$$Sh = 2 + 1,1Re^{0,6}Sc^{1/3} \text{ pour } 3 < Re < 10^4$$

#### **Temps caractéristique des transferts par diffusion macroporeuse**

$$t_m = \frac{R_p^2}{15\varepsilon_m D_{eff}}$$

avec

$$D_{eff} = \frac{\varepsilon_m}{\tau_m} \left[ \frac{1}{D_m} + \frac{1}{D_k} \right]^{-1}$$

et

$$D_k = \frac{8}{3} r_0 \sqrt{\frac{RT}{2\pi M}}$$

#### **Temps caractéristique des transferts par diffusion microporeuse**

$$t_\mu = \frac{r_c^2}{15D_\mu}$$

---

<sup>1</sup> Sun, L.-M., Meunier, F., 2003. Adsorption - Aspects théoriques. Techniques de l'ingénieur.

Brosillon, S., Manero, M.-H., Foussard, J.-N., 2001. Mass Transfer in VOC Adsorption on Zeolite: Experimental and Theoretical Breakthrough Curves. Environmental Science & Technology 35, 3571–3575.

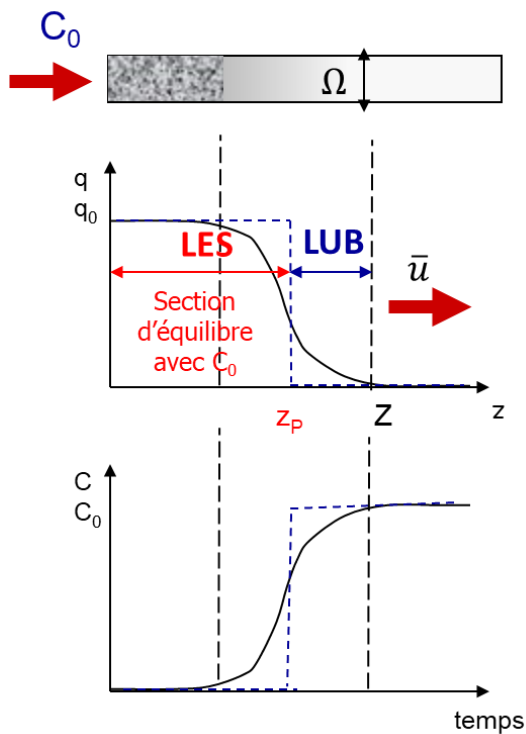
<sup>2</sup> Wakao, N., Funazkri, T., 1978. Effect of fluid dispersion coefficients on particle-to-fluid mass transfer coefficients in packed beds. Chemical Engineering Science 33, 1375–1384.

## Annexe 4 – Dimensionnement : méthode Length of Unused Bed (LUB)

### Définition : Length of Unused Bed

$$LUB = Z - Z_p = \bar{u}(t_s - t_p)$$

$$LUB = \frac{Z \cdot (t_s - t_p)}{t_s}$$



### Définition : fraction utile du lit

$$U = \frac{\text{capacité utilisée}}{\text{capacité totale}} = \frac{LES}{Z} = 1 - \frac{LUB}{Z} - q_r$$

### Masse d'adsorbant à mettre en œuvre

#### Adsorbant à traiter

$$m_{\text{adsorbant}} = Q(C_0 - C_f)t_p$$

avec  $C_0$  et  $C_f$  concentration en entrée et en sortie, respectivement.

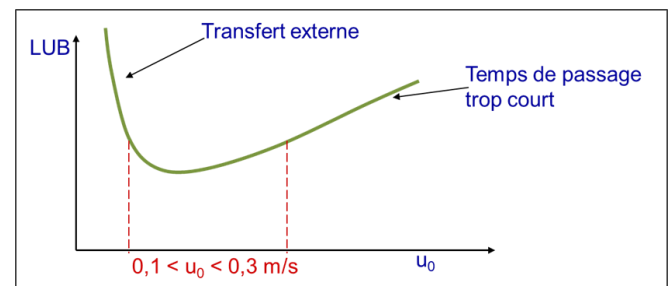
#### Masse d'adsorbant

$$M = \frac{m_{\text{adsorbant}}}{q^* \cdot U}$$

Avec  $q^*$  quantité adsorbée à l'équilibre avec  $C_0$ .

### Recommandations

Vitesse en fût vide :  $0,1 < u < 0,3 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$



Hauteur de la colonne :  $2 \cdot LUB < Z < 4 \cdot LUB$

## Nomenclature

Symboles latins		
$a_g$	$m^2 \cdot m^{-3}$	Surface spécifique
$b$	<i>Cf. expression équilibre</i>	Constante équilibre
$C$	$kg \cdot m^{-3}$	Concentration massique
$C_{BET}$	–	Constante BET
$d$	$m$	Diamètre
$D_{eff}$	$m^2 \cdot s^{-1}$	Coefficient de diffusion effectif
$D_m$	$m^2 \cdot s^{-1}$	Coefficient de diffusion moléculaire
$D_k$	$m^2 \cdot s^{-1}$	Coefficient de diffusion de Knudsen
$D_\mu$	$m^2 \cdot s^{-1}$	Coefficient de diffusion de surface
$F$	$kg \cdot kg^{-1}$	Constante de Freundlich
$K$	$kg \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$	Conductance globale de transfert
$k_e$	$kg \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$	Coefficient de transfert externe
$M$	$kg \cdot mol^{-1}$	Masse molaire
$m_s$	$kg$	Masse d'adsorbant
$P_v$	$Pa$	Pression de vapeur
$P_s$	$Pa$	Pression de saturation
$Q$	$m^3 \cdot h^{-1}$	Débit volumique
$q$	$kg \cdot kg^{-1}$	Concentration dans l'adsorbant
$q_m$	$kg \cdot kg^{-1}$	Capacité maximale d'adsorption
$q_r$	%	Fraction d'adsorbant résiduelle après régénération
$r_0$	$m$	Rayon de pore
$r_c$	$m$	Rayon grain d'adsorbant caractérisant la microporosité
$R$	$m$	Rayon grain d'adsorbant caractérisant la macroporosité
$t$	$s$	Temps
$t_p$	$s$	Temps de percé
$t_s$	$s$	Temps de saturation
$u$	$m \cdot s^{-1}$	Vitesse en fût vide
$U$	–	Fraction utile du lit
$Z$	$m$	Hauteur adsorbant
Symboles grecs		
$\beta$	–	Paramètre de normalisation
$\varepsilon$	–	Porosité
$\mu$	$Pa \cdot s$	Viscosité dynamique
$\rho$	$kg \cdot m^{-3}$	Masse volumique
$\tau$	–	Tortuosité
$\Omega$	$m^2$	Section
Nombres adimensionnels		
$Re$	–	Nombre de Reynolds
$Sc$	–	Nombre de Schimdt
$Sh$	–	Nombre de Sherwood