

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

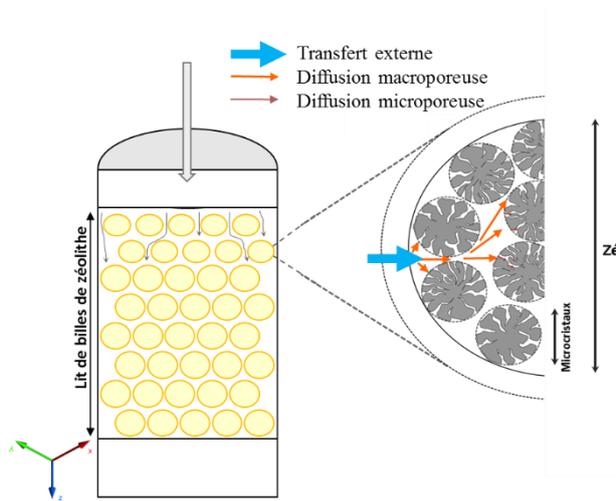
Annexe 2 – Modélisation d'une courbe de percée

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 macroposité

Le bilan dans la phase gaz et dans la macroposité

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

Transfert dans microposité

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

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 macroposité)

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

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., 2001¹

Temps caractéristique des transferts externes

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

avec

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

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

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

et (Wakao and Funazkri, 1978²)

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

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

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

¹ 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.

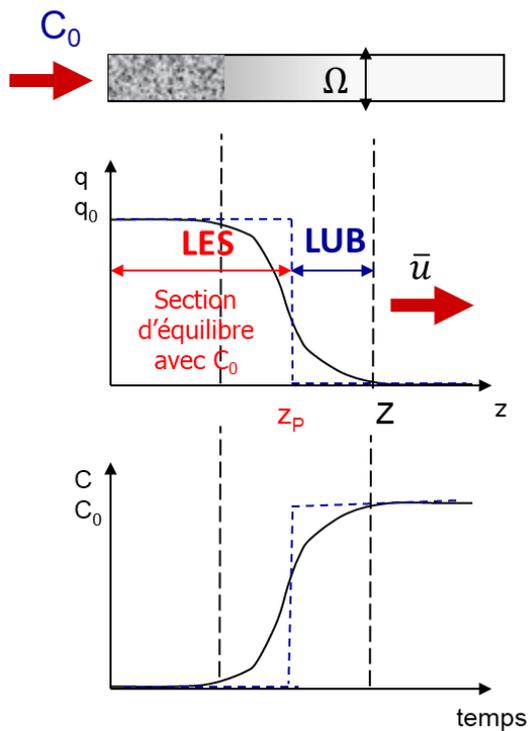
² Wakao, N., Funazkri, T., 1978. Effect of fluid dispersion coefficients on particle-to-fluid mass transfer coefficients in packed beds. Chemical Engineering Science 33, 1375–1384.

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.

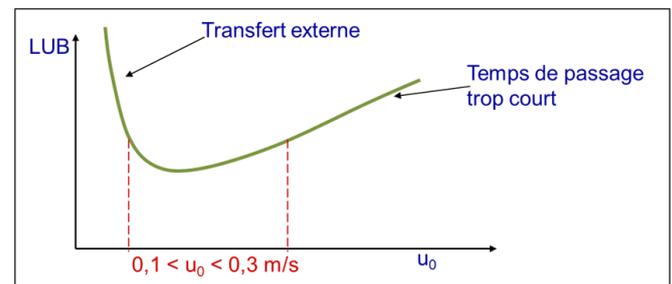
Masse d'adsorbant

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

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_μ	$m^2 \cdot s^{-1}$	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		
β	–	Paramètre de normalisation
ε	–	Porosité
μ	$Pa \cdot s$	Viscosité dynamique
ρ	$kg \cdot m^{-3}$	Masse volumique
τ	–	Tortuosité
Ω	m^2	Section
Nombres adimensionnels		
Re	–	Nombre de Reynolds
Sc	–	Nombre de Schimdt
Sh	–	Nombre de Sherwood