

Contribution à la modélisation dynamique simplifiée d'un procédé d'adsorption modulée en pression

Damien Leinekugel-le-Cocq

sous la direction de :

C. Jallut et M. Tayakout-Fayolle

- LAGEP : pilote pour des études de contrôle
- Projet européen GEOPLEX :
 - ◆ pilote
 - ◆ modélisation
- Collaborations avec l'IFP :
 - ◆ convention d'étude sur le modèle à contre-courant équivalent
 - ◆ cession du simulateur

Plan de l'exposé

Introduction

Modèle
multi-échelle

Modèle à
contre-courant

Conclusion

- Description du procédé et problématique
- Modélisation multi-échelle
 - ◆ description du modèle
 - ◆ validation
- Approximation par un système continu équivalent

Plan de l'exposé

Introduction

Modèle
multi-échelle

Modèle à
contre-courant

Conclusion

- Description du procédé et problématique
- **Modélisation multi-échelle**
 - ◆ description du modèle
 - ◆ validation
- Approximation par un système continu équivalent

Plan de l'exposé

Introduction

Modèle
multi-échelle

Modèle à
contre-courant

Conclusion

- Description du procédé et problématique
- Modélisation multi-échelle
 - ◆ description du modèle
 - ◆ validation
- Approximation par un système continu équivalent

Introduction

- Procédés d'adsorption
- Procédés PSA
- Pilote
- Problématique et Objectifs
- Solutions proposées

Modèle multi-échelle

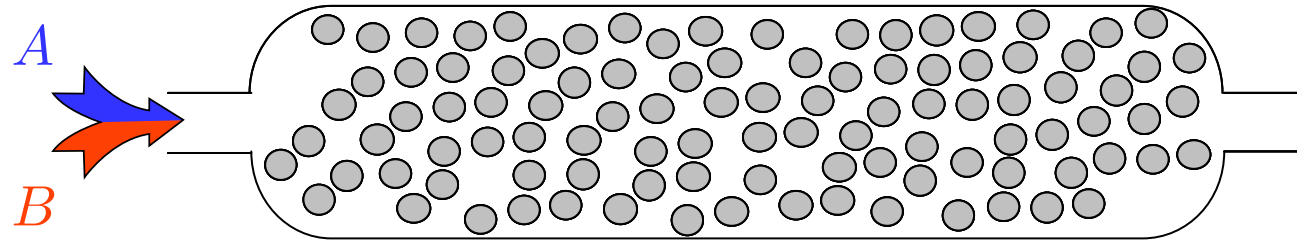
Modèle à contre-courant

Conclusion

Description du procédé

Problématique

Procédés d'adsorption sur lit fixe



Introduction

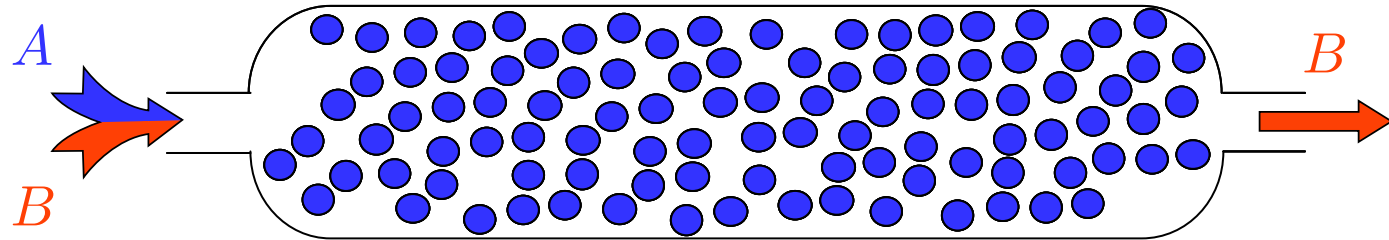
- **Procédés d'adsorption**
- Procédés PSA
- Pilote
- Problématique et Objectifs
- Solutions proposées

Modèle multi-échelle

Modèle à contre-courant

Conclusion

Procédés d'adsorption sur lit fixe



- Adsorption sélective du constituant *A*.

Introduction

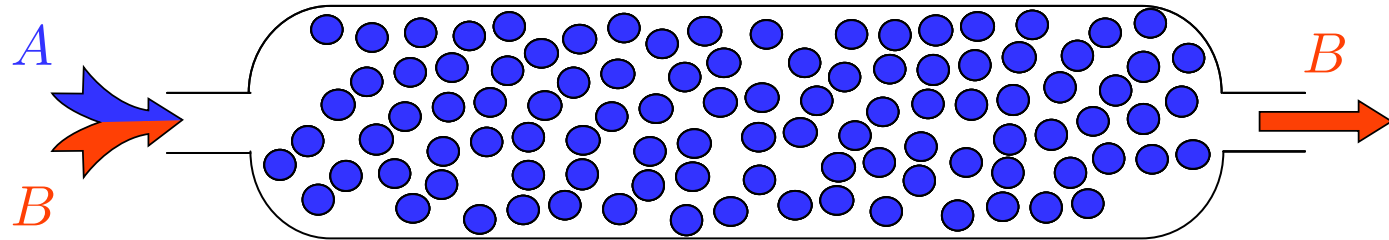
- Procédés d'adsorption
- Procédés PSA
- Pilote
- Problématique et Objectifs
- Solutions proposées

Modèle multi-échelle

Modèle à contre-courant

Conclusion

Procédés d'adsorption sur lit fixe



- Adsorption sélective du constituant *A*.
- Causes de cette sélectivité :
 - ◆ thermodynamiques (équilibres de sorption) ;
 - ◆ cinétiques (transfert de matière).

Introduction

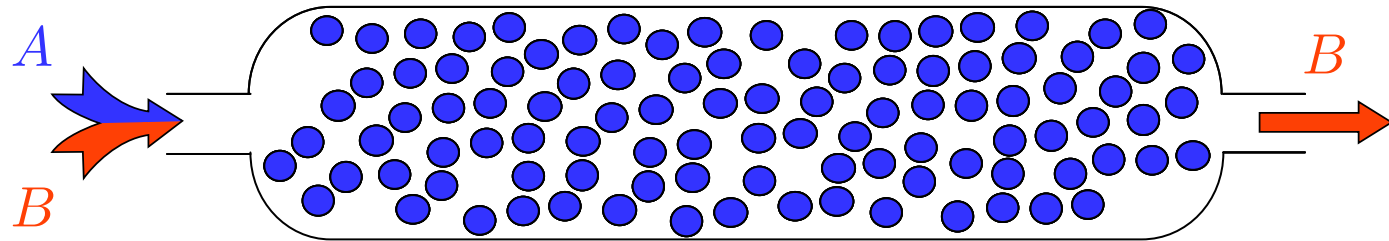
- **Procédés d'adsorption**
- Procédés PSA
- Pilote
- Problématique et Objectifs
- Solutions proposées

Modèle multi-échelle

Modèle à contre-courant

Conclusion

Procédés d'adsorption sur lit fixe



- Adsorption sélective du constituant *A*.
- Causes de cette sélectivité :
 - ◆ thermodynamiques (équilibres de sorption) ;
 - ◆ cinétiques (transfert de matière).
- **Saturation** du lit \Rightarrow **régénération** de l'adsorbant \Rightarrow procédés **cycliques**.

Introduction

- **Procédés d'adsorption**
- Procédés PSA
- Pilote
- Problématique et Objectifs
- Solutions proposées

Modèle multi-échelle

Modèle à contre-courant

Conclusion

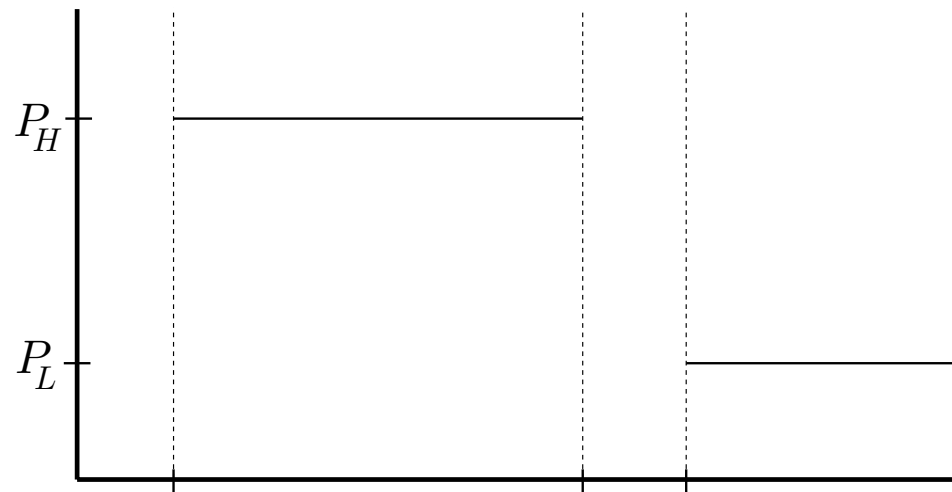
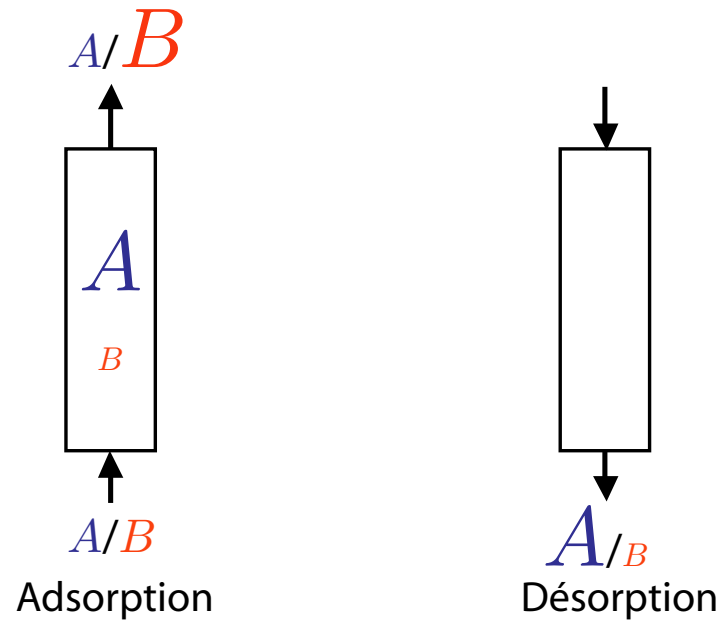
Introduction

- Procédés d'adsorption
- **Procédés PSA**
- Pilote
- Problématique et Objectifs
- Solutions proposées

Modèle multi-échelle

Modèle à contre-courant

Conclusion



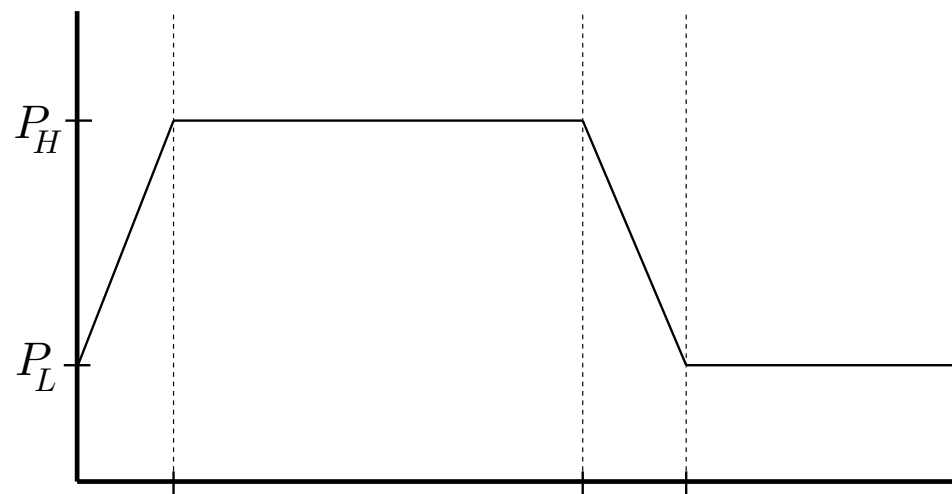
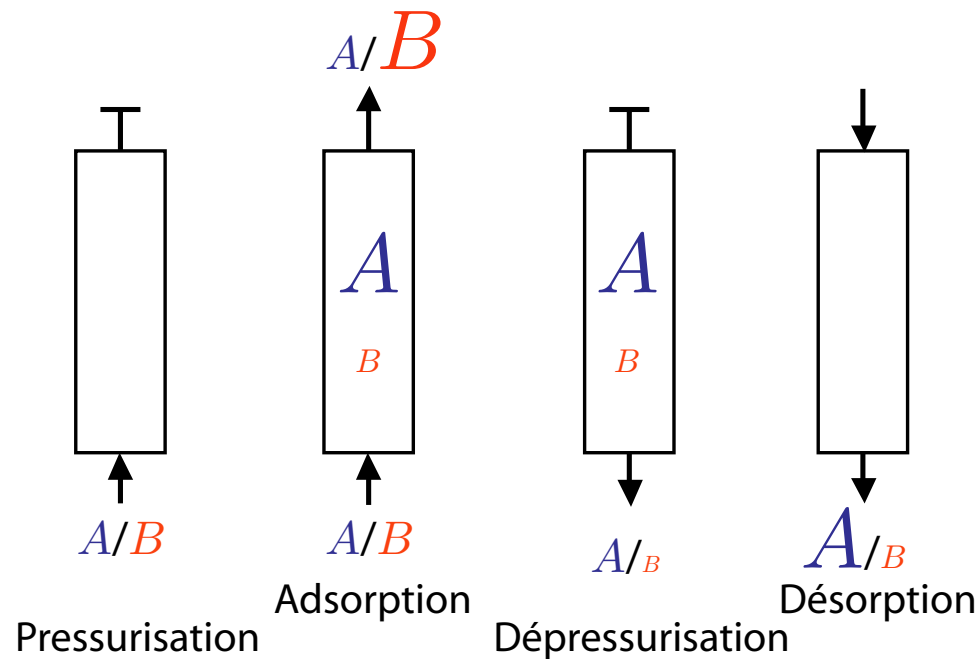
Introduction

- Procédés d'adsorption
- **Procédés PSA**
- Pilote
- Problématique et Objectifs
- Solutions proposées

Modèle multi-échelle

Modèle à contre-courant

Conclusion



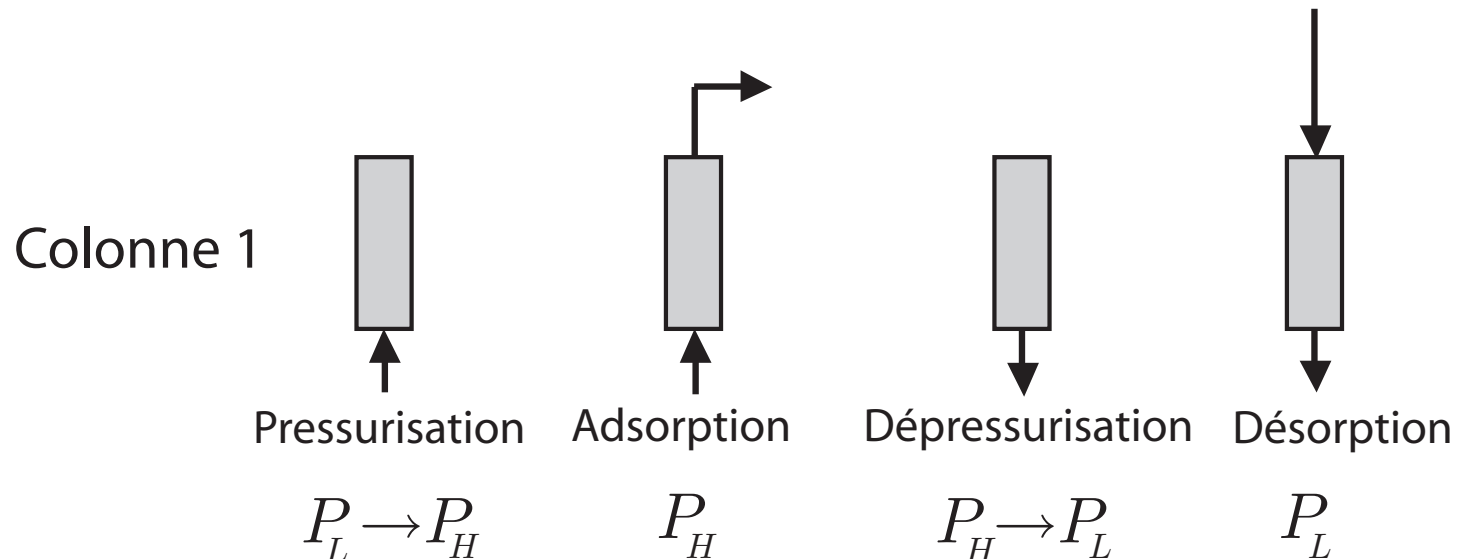
Introduction

- Procédés d'adsorption
- **Procédés PSA**
- Pilote
- Problématique et Objectifs
- Solutions proposées

Modèle multi-échelle

Modèle à contre-courant

Conclusion



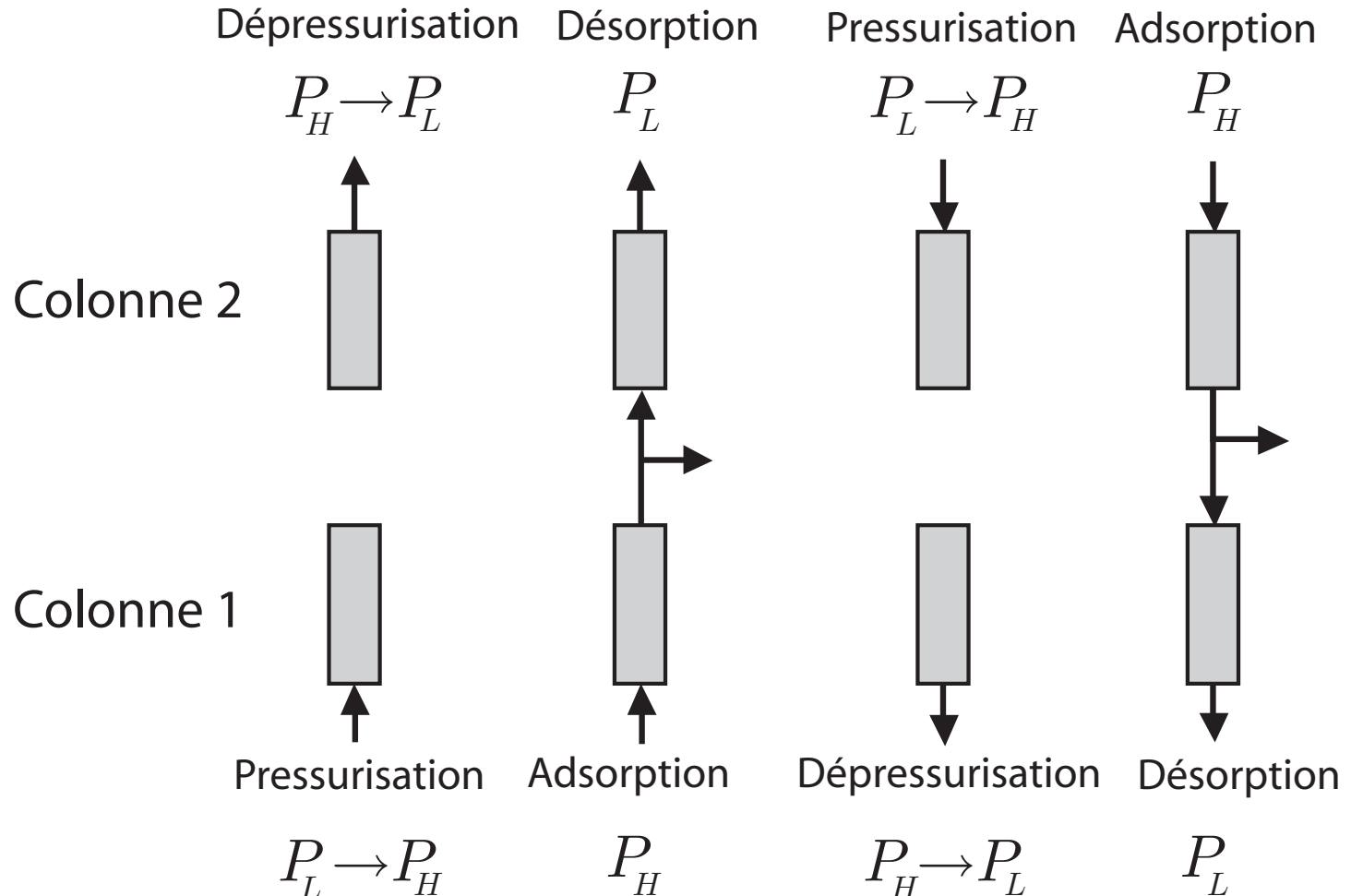
Introduction

- Procédés d'adsorption
- **Procédés PSA**
- Pilote
- Problématique et Objectifs
- Solutions proposées

Modèle multi-échelle

Modèle à contre-courant

Conclusion



Pilote

Introduction

- Procédés d'adsorption
- Procédés PSA
- **Pilote**
- Problématique et Objectifs
- Solutions proposées

Modèle multi-échelle

Modèle à contre-courant

Conclusion

- 2 colonnes ($L = 0,25$ m, $R_{int} = 10^{-2}$ m)
- 5 thermocouples le long de chaque colonne
- Détecteur IR (CH_4/CO_2)
- Installation modulable (perçages, PSA avec/sans recyclage)
- Contrôle et acquisition informatisés



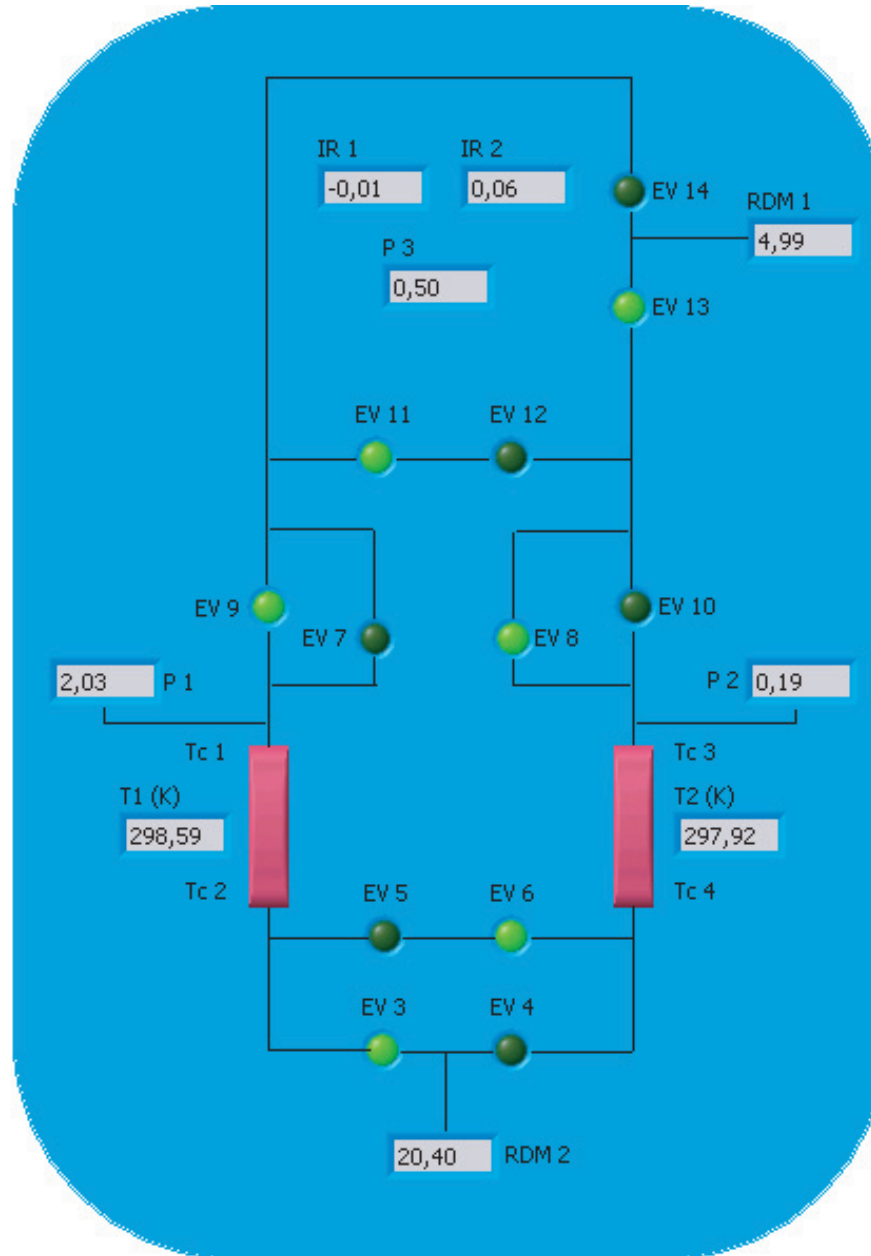
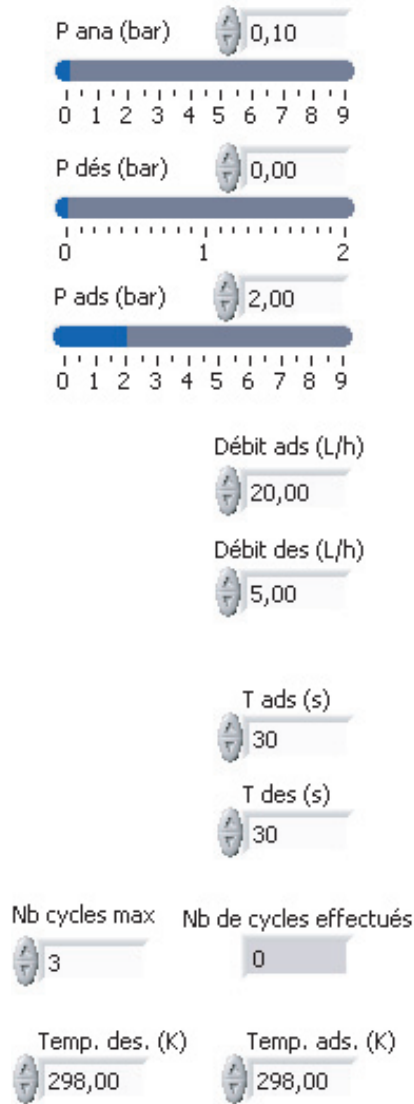
Introduction

- Procédés d'adsorption
- Procédés PSA
- **Pilote**
- Problématique et Objectifs
- Solutions proposées

Modèle multi-échelle

Modèle à contre-courant

Conclusion



fréq. de boucle réelle
0,00

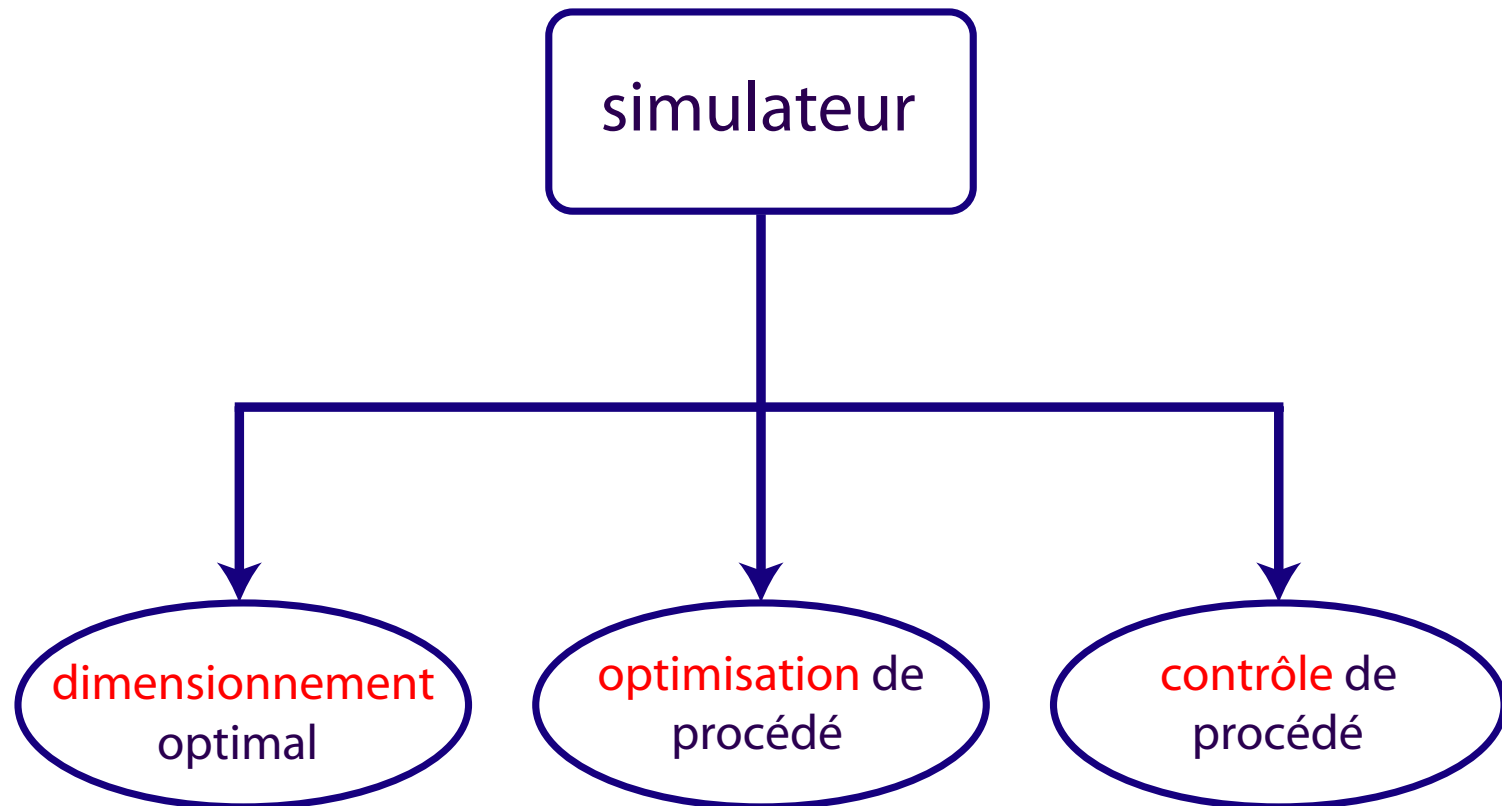
Introduction

- Procédés d'adsorption
- Procédés PSA
- Pilote
- **Problématique et Objectifs**
- Solutions proposées

Modèle multi-échelle

Modèle à contre-courant

Conclusion



Problématique et Objectifs

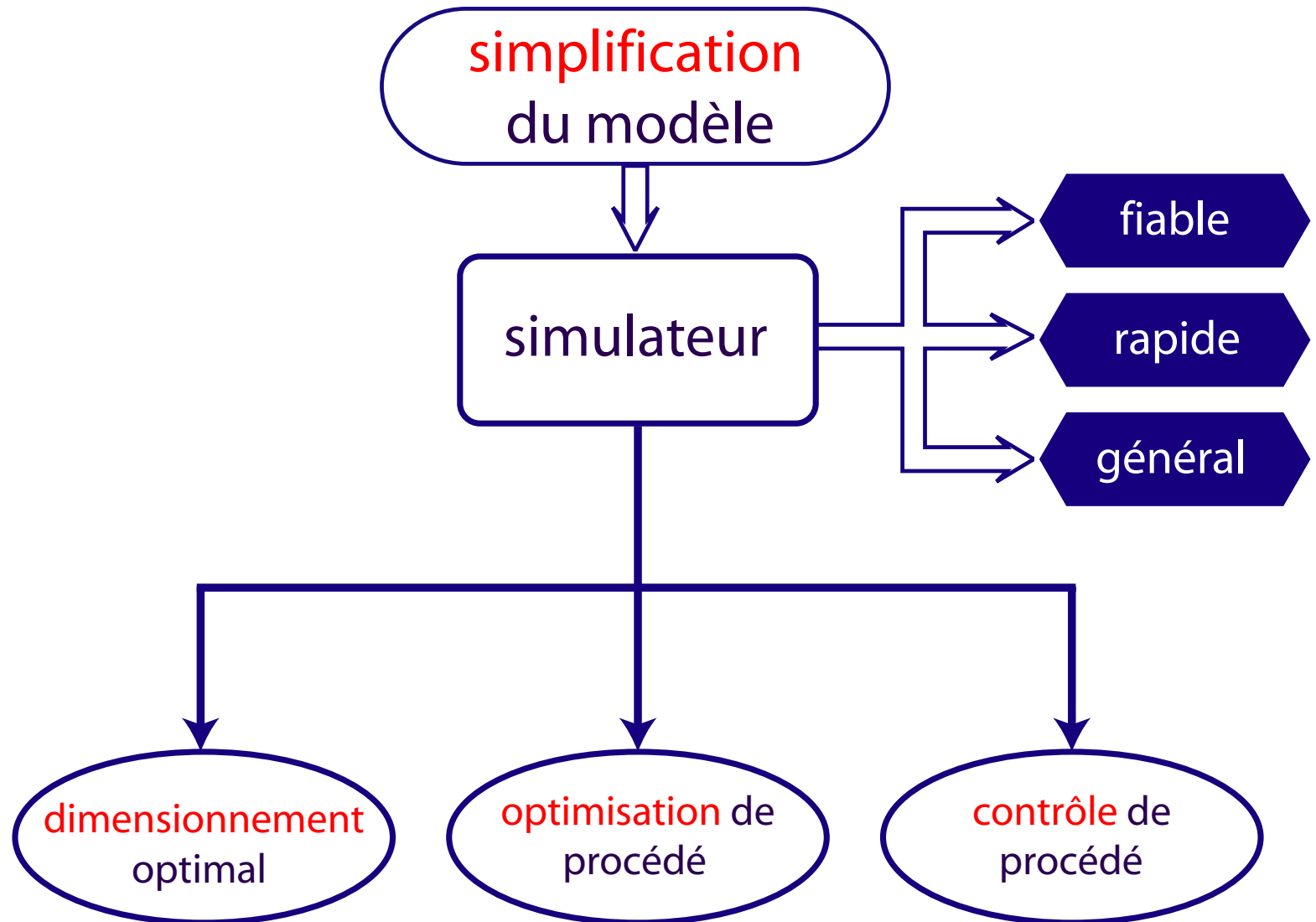
Introduction

- Procédés d'adsorption
- Procédés PSA
- Pilote
- **Problématique et Objectifs**
- Solutions proposées

Modèle multi-échelle

Modèle à contre-courant

Conclusion



Étude bibliographique

Introduction

- Procédés d'adsorption
- Procédés PSA
- Pilote
- **Problématique et Objectifs**
- Solutions proposées

Modèle multi-échelle

Modèle à contre-courant

Conclusion

- Modèles basés sur l'hypothèse d'**équilibre local** :
 - ❖ résolution très **rapide**
 - ❖ emploi limité aux séparations thermodynamiques, **hypothèse très restrictive.**

Étude bibliographique

Introduction

- Procédés d'adsorption
- Procédés PSA
- Pilote
- **Problématique et Objectifs**
- Solutions proposées

Modèle multi-échelle

Modèle à contre-courant

Conclusion

- Modèles basés sur l'hypothèse d'**équilibre local** :
 - ❖ résolution très **rapide**
 - ❖ emploi limité aux séparations thermodynamiques, **hypothèse très restrictive.**
- Modèles basés sur la **simplification des modèles intra-granulaires** :
 - ❖ littérature très fournie pour les lits d'adsorbant monodisperse (LDF)
 - ❖ peu de modèles concernant les lits d'adsorbant bidisperse, **calculs lourds.**

Solutions proposées

Introduction

- Procédés d'adsorption
- Procédés PSA
- Pilote
- Problématique et Objectifs
- Solutions proposées

Modèle multi-échelle

Modèle à contre-courant

Conclusion

- **Modèle multi-échelle**

Simulateur précis et rapide pour des séparations sur **adsorbant bidisperse** : dimensionnement fin.

Solutions proposées

Introduction

- Procédés d'adsorption
- Procédés PSA
- Pilote
- Problématique et Objectifs
- Solutions proposées

Modèle multi-échelle

Modèle à contre-courant

Conclusion

- **Modèle multi-échelle**

Simulateur précis et rapide pour des séparations sur **adsorbant bidisperse** : dimensionnement fin.

- **Modèle à contre-courant**

Simulateur très **rapide** adapté aux séparations cinétiques : étude de faisabilité, dimensionnement grossier, et éventuellement contrôle.

Introduction

Modèle multi-échelle

- Différentes échelles
- Modèle de colonne
- Échelle extra-granulaire
- Échelles intra-granulaires
- Validation du modèle cinétique
- Validation expérimentale

Modèle à contre-courant

Conclusion

Modélisation multi-échelle

Lit de grains bidisperses : différentes échelles

Introduction

Modèle multi-échelle

- Différentes échelles
- Modèle de colonne
- Échelle extra-granulaire
- Échelles intra-granulaires
- Validation du modèle cinétique
- Validation expérimentale

Modèle à contre-courant

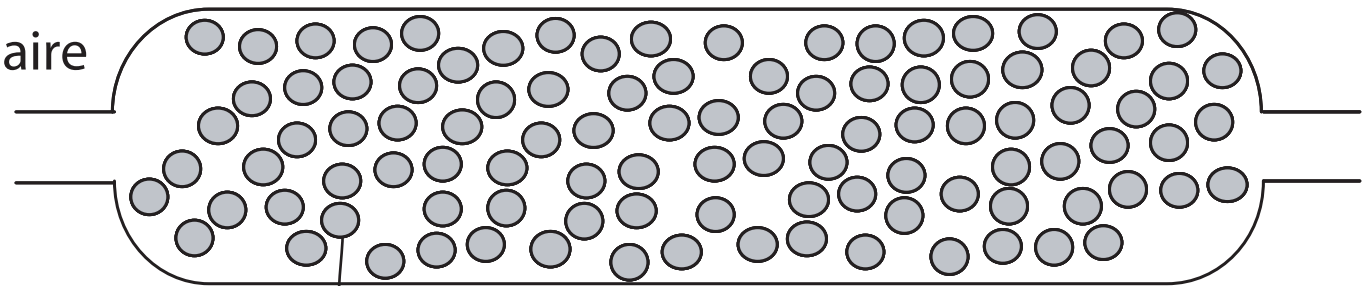
Conclusion

Phase

extra-granulaire

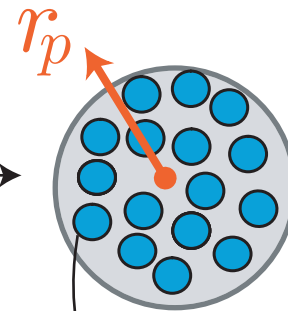
$L \approx 25$ cm

$R_{int} \approx 1$ cm



Phase macroporeuse

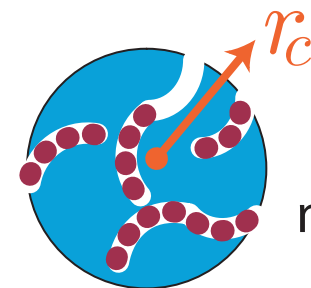
$R_p \approx 1,24$ mm



Grain bidisperse

Phase microporeuse

$R_c \approx 1$ μ m



Cristal microporeux

Modèle multi-échelle d'un lit d'adsorbant

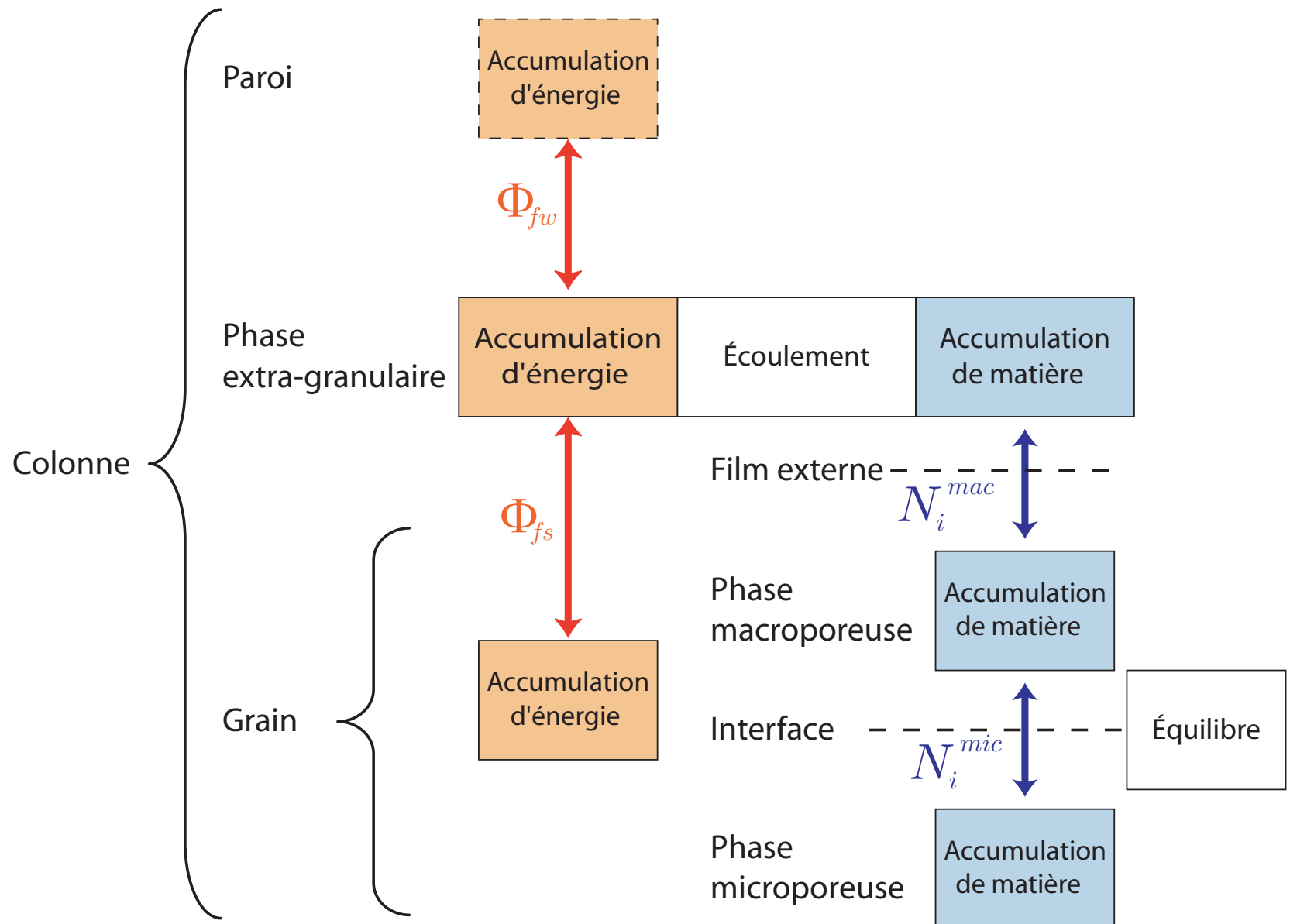
Introduction

Modèle multi-échelle

- Différentes échelles
- **Modèle de colonne**
- Échelle extra-granulaire
- Échelles intra-granulaires
- Validation du modèle cinétique
- Validation expérimentale

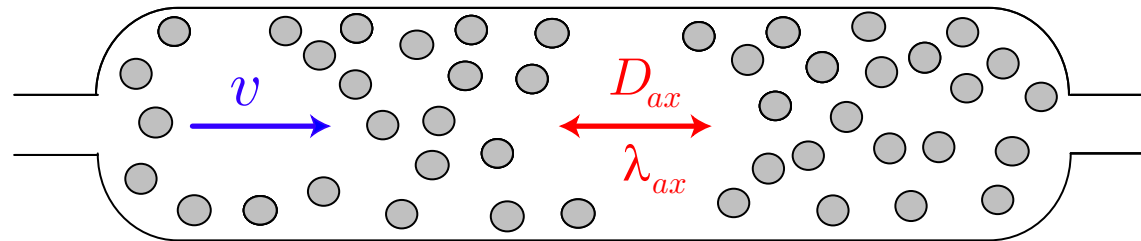
Modèle à contre-courant

Conclusion



Échelle extra-granulaire

Hypothèses :



- Faible vitesse \Rightarrow **écoulement piston avec dispersion axiale**
- Faible vitesse + cristaux agglomérés + colonne de petite dimension \Rightarrow **pertes de charge négligeables**

Introduction

Modèle multi-échelle

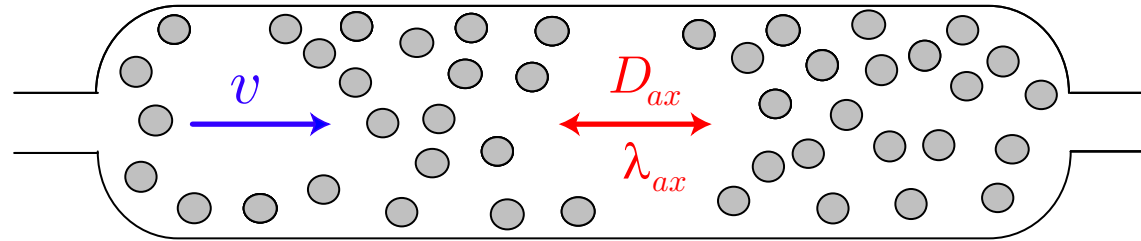
- Différentes échelles
- Modèle de colonne
- **Échelle extra-granulaire**
- Échelles intra-granulaires
- Validation du modèle cinétique
- Validation expérimentale

Modèle à contre-courant

Conclusion

Échelle extra-granulaire

Hypothèses :



- Faible vitesse \Rightarrow **écoulement piston avec dispersion axiale**
- Faible vitesse + cristaux agglomérés + colonne de petite dimension \Rightarrow **pertes de charge négligeables**

Simulations :

- Phase extra-granulaire = système à paramètres répartis
 \Rightarrow modèle extra-granulaire constitué d'**EDP**
 \Rightarrow **discrétisation** (collocations orthogonales)

Introduction

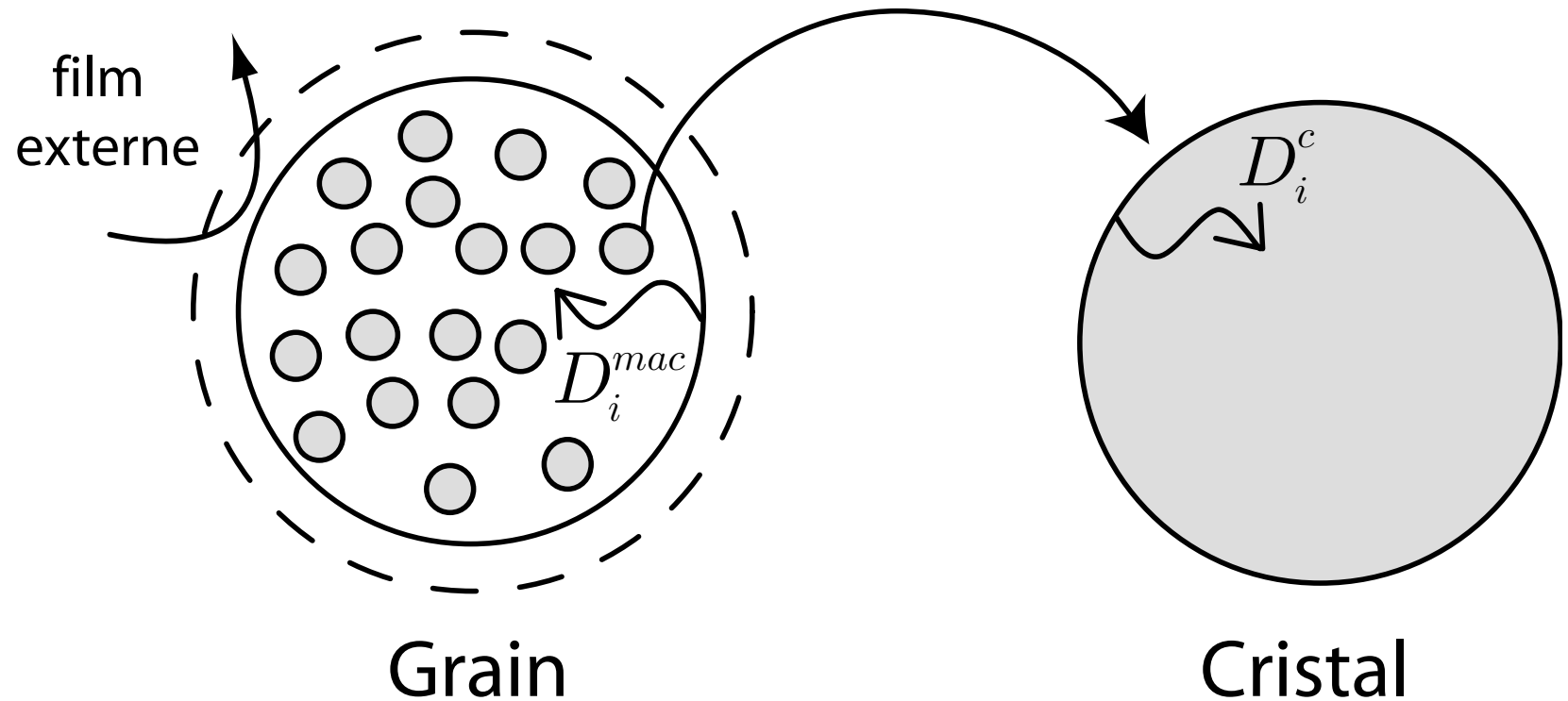
Modèle multi-échelle

- Différentes échelles
- Modèle de colonne
- **Échelle extra-granulaire**
- Échelles intra-granulaires
- Validation du modèle cinétique
- Validation expérimentale

Modèle à contre-courant

Conclusion

Transfert de matière intra-granulaire



Introduction

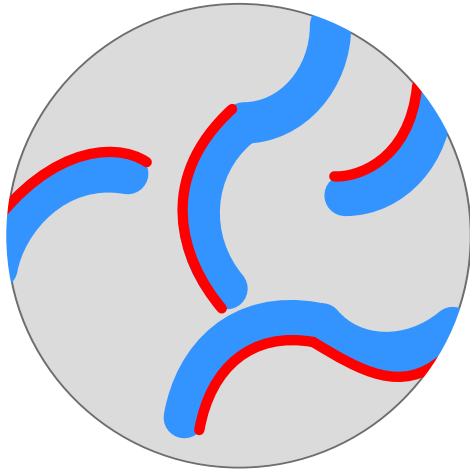
Modèle multi-échelle

- Différentes échelles
- Modèle de colonne
- Échelle extra-granulaire
- **Échelles intra-granulaires**
- Validation du modèle cinétique
- Validation expérimentale

Modèle à contre-courant

Conclusion

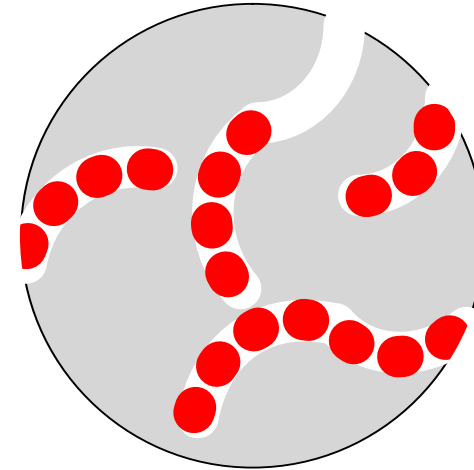
Grain monodisperse macroporeux



Coexistence de 2 phases en équilibre : **une phase gazeuse** (c_i) et **une phase adsorbée** (q_i).

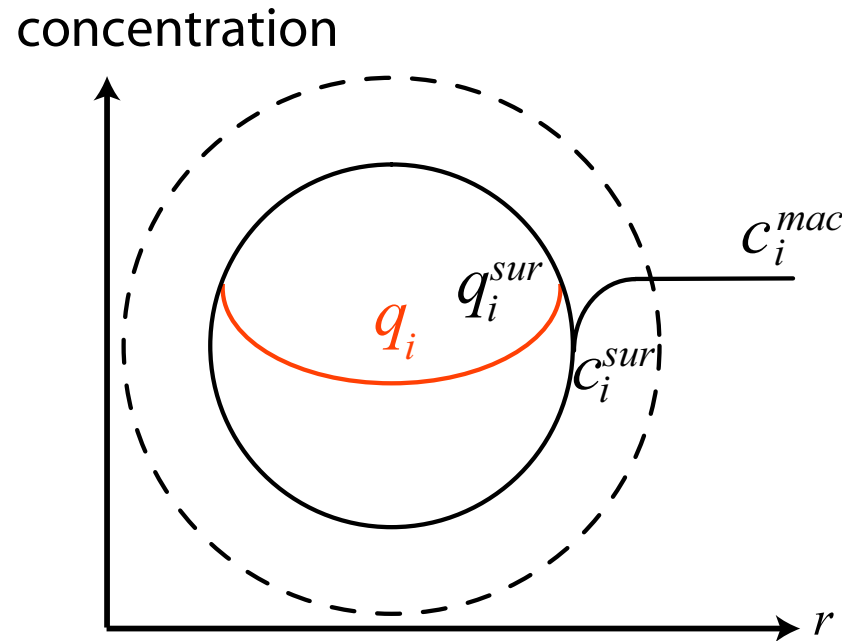
Choix de variable d'état : c_i ou q_i .

Cristal microporeux



Absence de phase gazeuse dans les micropores.

Variable d'état classique : q_i .



Introduction

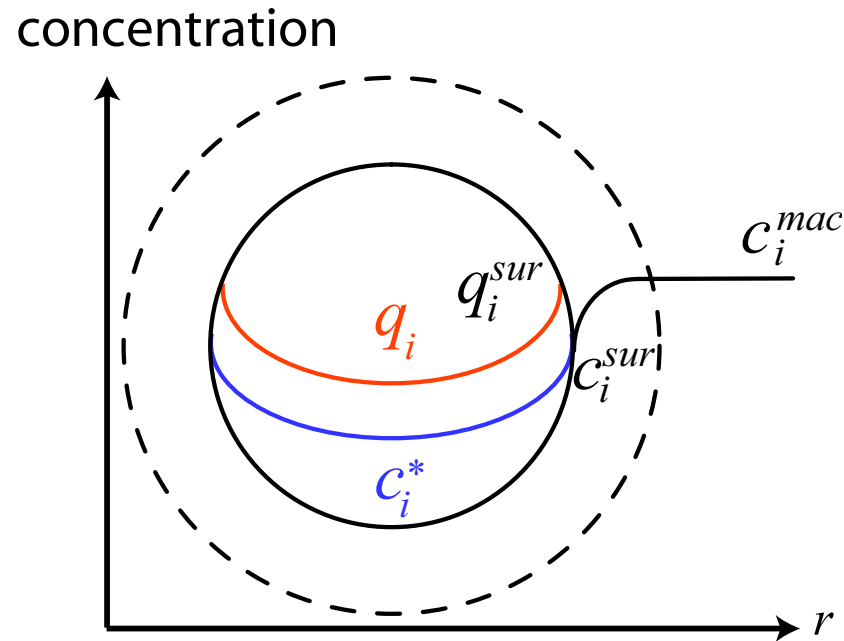
Modèle multi-échelle

- Différentes échelles
- Modèle de colonne
- Échelle extra-granulaire
- **Échelles intra-granulaires**
- Validation du modèle cinétique
- Validation expérimentale

Modèle à contre-courant

Conclusion

Modèle intra-cristallin : choix de la variable d'état



q_i

- discontinuité à l'interface
⇒ conservation de c_i^{sur}

c_i^*

- élimination de la variable c_i^{sur}

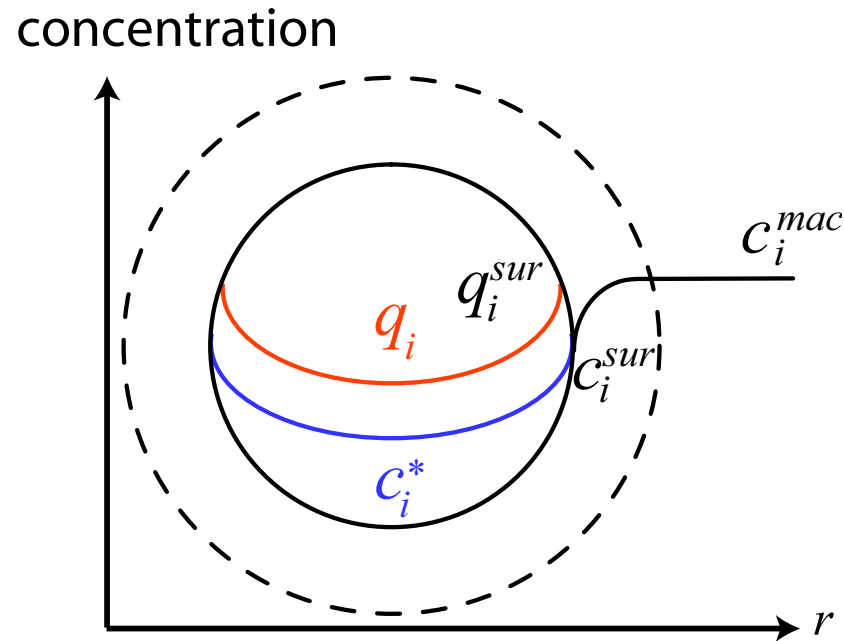
Introduction

Modèle multi-échelle

- Différentes échelles
- Modèle de colonne
- Échelle extra-granulaire
- **Échelles intra-granulaires**
- Validation du modèle cinétique
- Validation expérimentale

Modèle à contre-courant

Conclusion



q_i

- discontinuité à l'interface
 \Rightarrow conservation de c_i^{sur}
- paramètres cinétiques et thermodynamiques découplés

c_i^*

- élimination de la variable c_i^{sur}
- couplage des paramètres
 \Rightarrow diminution du nombre de paramètres à optimiser

Introduction

Modèle multi-échelle

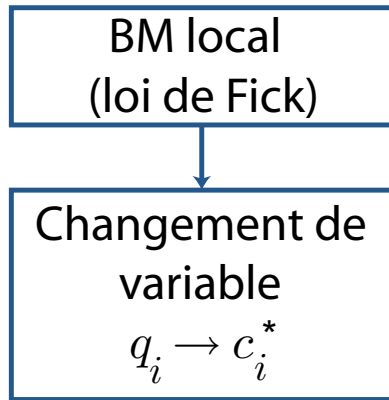
- Différentes échelles
- Modèle de colonne
- Échelle extra-granulaire
- **Échelles intra-granulaires**
- Validation du modèle cinétique
- Validation expérimentale

Modèle à contre-courant

Conclusion

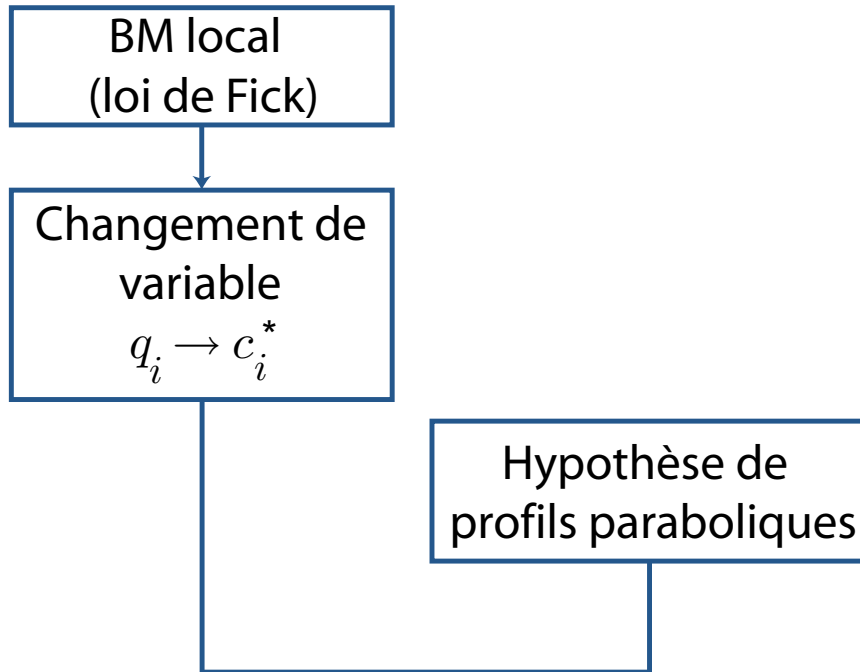
BM local
(loi de Fick)

$$\frac{\partial q_i}{\partial t} = \frac{1}{r_c^2} \frac{\partial}{\partial r_c} \left(r_c^2 D_i^c \frac{\partial q_i}{\partial r_c} \right)$$



$$\frac{\partial q_i}{\partial t} = \frac{1}{r_c^2} \frac{\partial}{\partial r_c} \left(r_c^2 D_i^c \frac{\partial q_i}{\partial r_c} \right)$$

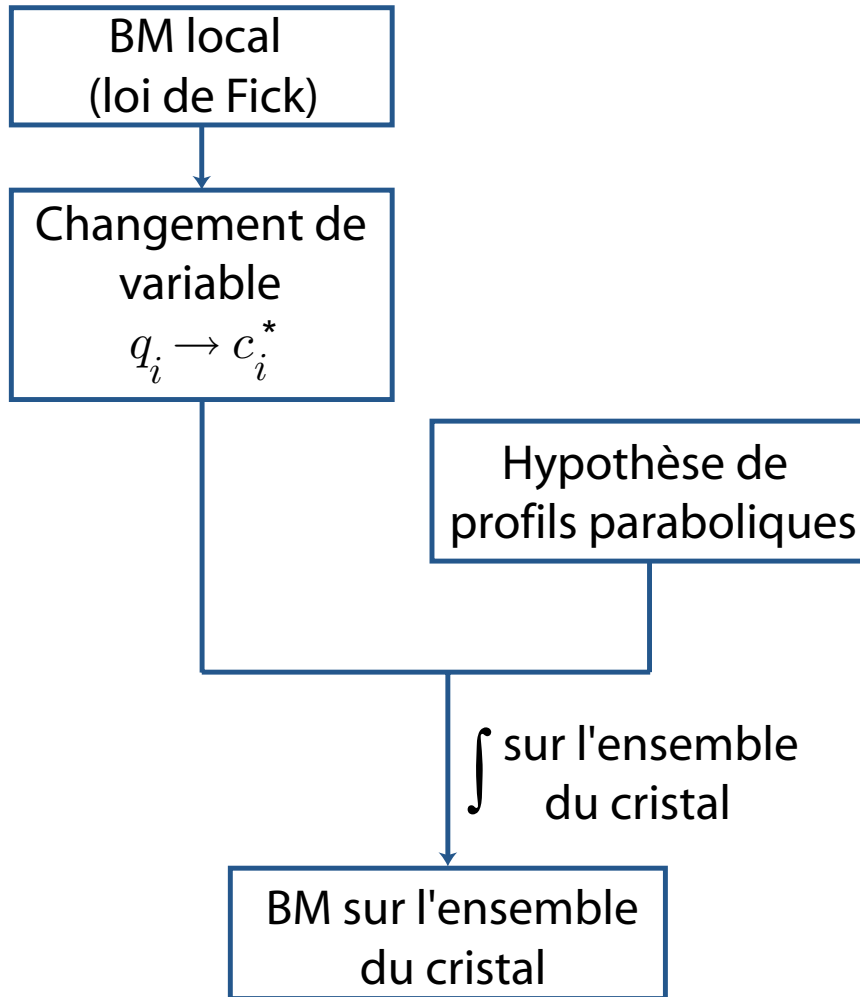
$$\frac{\partial q_i}{\partial x} = \sum_{j=1}^{n_c} \left[\frac{\partial q_i}{\partial c_j^*} \frac{\partial c_j^*}{\partial x} \right] + \left[\frac{\partial q_i}{\partial T_s} \frac{\partial T_s}{\partial x} \right]$$



$$\frac{\partial q_i}{\partial t} = \frac{1}{r_c^2} \frac{\partial}{\partial r_c} \left(r_c^2 D_i^c \frac{\partial q_i}{\partial r_c} \right)$$

$$\frac{\partial q_i}{\partial x} = \sum_{j=1}^{n_c} \left[\frac{\partial q_i}{\partial c_j^*} \frac{\partial c_j^*}{\partial x} \right] + \left[\frac{\partial q_i}{\partial T_s} \frac{\partial T_s}{\partial x} \right]$$

$$c_i^*(r_c) = c_i^{sur} + (c_i^{sur} - \bar{c}_i^*) \frac{5}{2} \left(\frac{r_c^2}{R_c^2} - 1 \right)$$



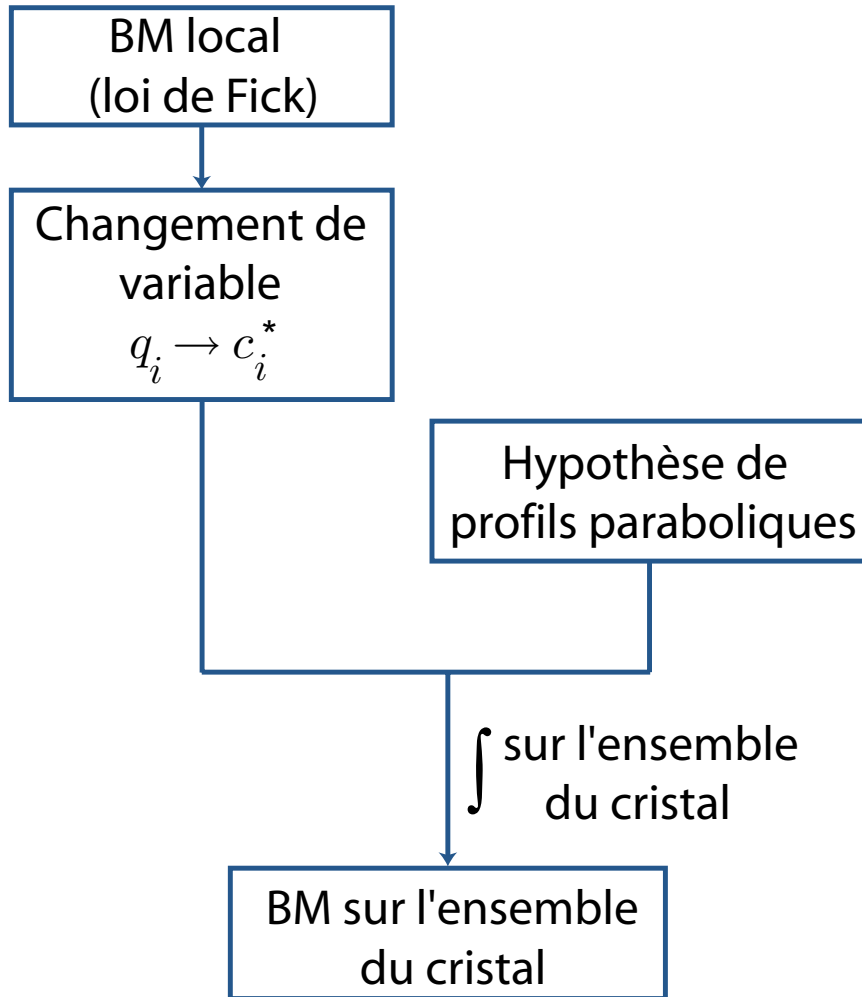
$$\frac{\partial q_i}{\partial t} = \frac{1}{r_c^2} \frac{\partial}{\partial r_c} \left(r_c^2 D_i^c \frac{\partial q_i}{\partial r_c} \right)$$

$$\frac{\partial q_i}{\partial x} = \sum_{j=1}^{n_c} \left[\frac{\partial q_i}{\partial c_j^*} \frac{\partial c_j^*}{\partial x} \right] + \left[\frac{\partial q_i}{\partial T_s} \frac{\partial T_s}{\partial x} \right]$$

$$c_i^*(r_c) = c_i^{sur} + (c_i^{sur} - \bar{c}_i^*) \frac{5}{2} \left(\frac{r_c^2}{R_c^2} - 1 \right)$$

$$\sum_{j=1}^{n_c} \bar{C}_{i,j}^q \frac{\partial \bar{c}_j^*}{\partial t} + \bar{C}_{i,T}^q \frac{\partial \bar{T}_s}{\partial t}$$

$$= \frac{15}{R_c^2} D_i^c(R_c) \sum_{j=1}^{n_c} C_{i,j}^q(R_c) (c_j^{sur} - \bar{c}_j^*)$$



$$\frac{\partial q_i}{\partial t} = \frac{1}{r_c^2} \frac{\partial}{\partial r_c} \left(r_c^2 D_i^c \frac{\partial q_i}{\partial r_c} \right)$$

$$\frac{\partial q_i}{\partial x} = \sum_{j=1}^{n_c} \left[\frac{\partial q_i}{\partial c_j^*} \frac{\partial c_j^*}{\partial x} \right] + \left[\frac{\partial q_i}{\partial T_s} \frac{\partial T_s}{\partial x} \right]$$

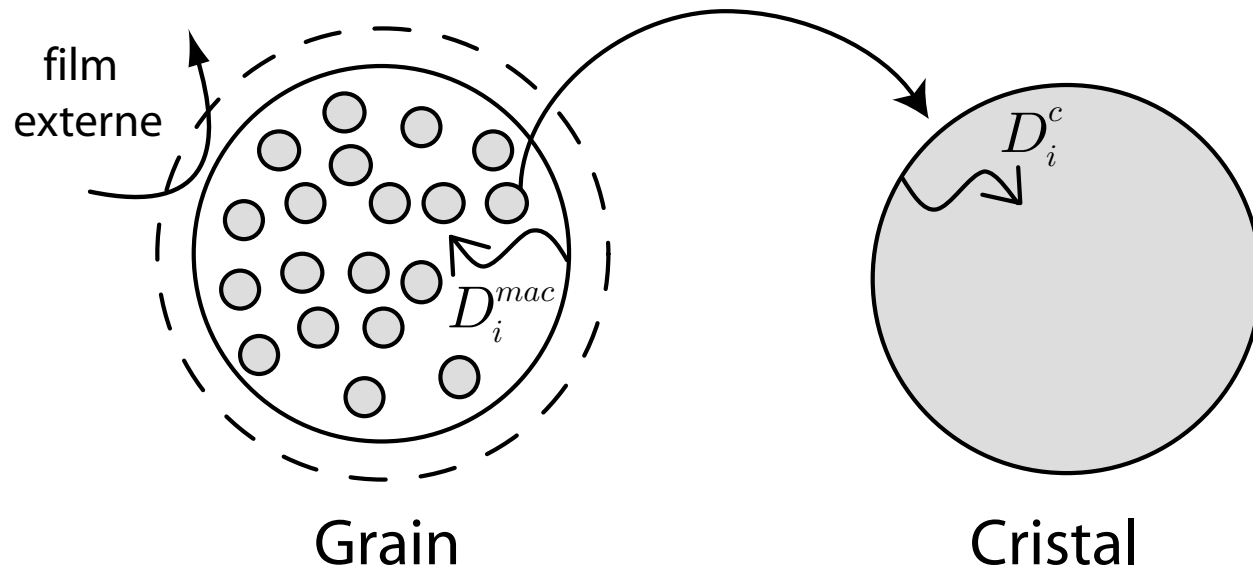
$$c_i^*(r_c) = c_i^{sur} + (c_i^{sur} - \bar{c}_i^*) \frac{5}{2} \left(\frac{r_c^2}{R_c^2} - 1 \right)$$

$$\sum_{j=1}^{n_c} \bar{C}_{i,j}^q \frac{\partial \bar{c}_j^*}{\partial t} + \bar{C}_{i,T}^q \frac{\partial \bar{T}_s}{\partial t}$$

$$= \frac{15}{R_c^2} D_i^c(R_c) \sum_{j=1}^{n_c} C_{i,j}^q(R_c) (c_j^{sur} - \bar{c}_j^*)$$

Hypothèse de **profils paraboliques** de c_i^* \Rightarrow description globale du cristal : élimination de la coordonnée spatiale r_c

Transfert de matière intra-granulaire



Introduction

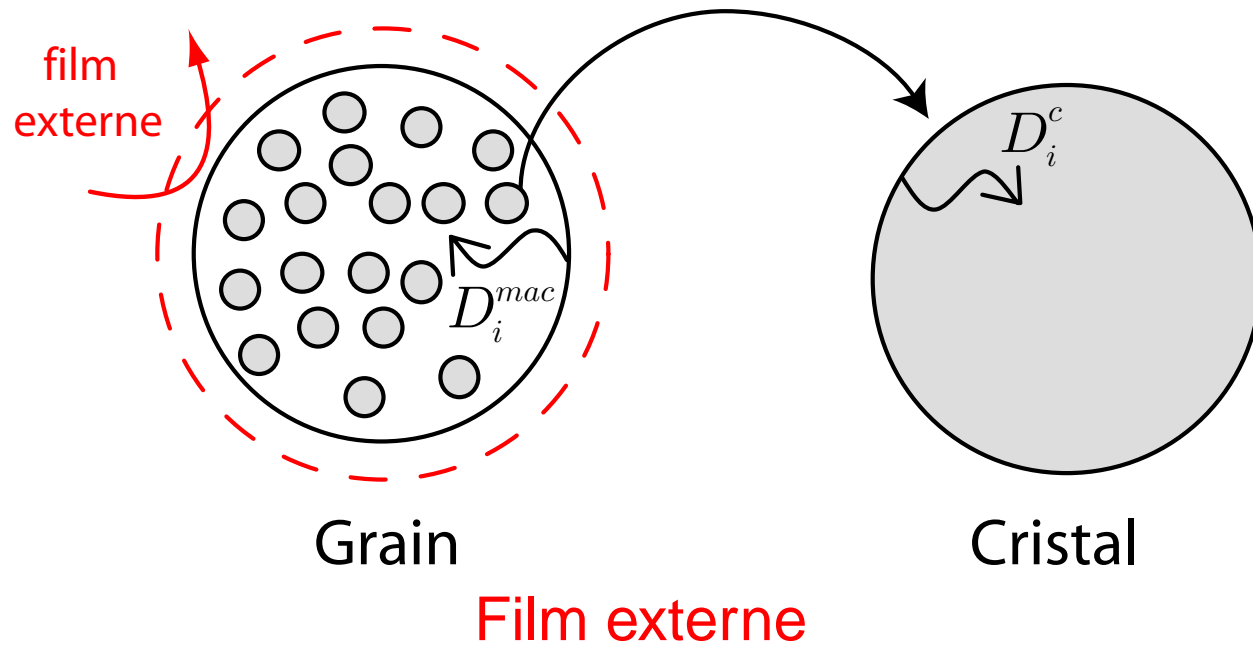
Modèle multi-échelle

- Différentes échelles
- Modèle de colonne
- Échelle extra-granulaire
- **Échelles intra-granulaires**
- Validation du modèle cinétique
- Validation expérimentale

Modèle à contre-courant

Conclusion

Transfert de matière intra-granulaire



Modèle classique

Flux convectif nul \Rightarrow aucune compensation au phénomène d'adsorption dans les cristaux (**BM incohérents**, $c_i^{mac} < 0$)

$$N_i^{mac} = \frac{D_i^m c_t}{\delta} \left(x_i^{ext} - x_i^{s-p} \right)$$

Modèle reformulé

Prise en compte d'un flux convectif $N_t^{mac} \Rightarrow$ cohérence des BM

$$N_i^{mac} = N_t^{mac} \frac{x_i^{ext} - x_i^{s-p} e^{-\frac{N_t^{mac} \delta}{D_i^m c_t}}}{1 - e^{-\frac{N_t^{mac} \delta}{D_i^m c_t}}}$$

Introduction

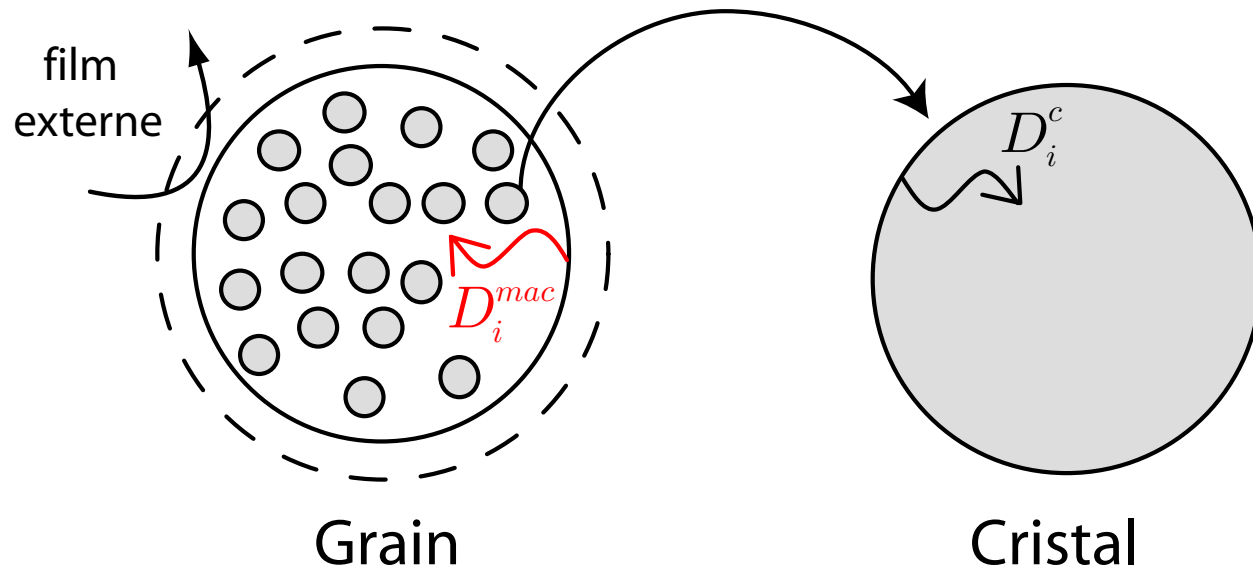
Modèle multi-échelle

- Différentes échelles
- Modèle de colonne
- Échelle extra-granulaire
- Échelles intra-granulaires
- Validation du modèle cinétique
- Validation expérimentale

Modèle à contre-courant

Conclusion

Transfert de matière intra-granulaire



Macropores

Résistances au transfert dans les macropores concentrées dans un film

⇒

description globale des macropores : élimination de la coordonnée spatiale r_p

Introduction

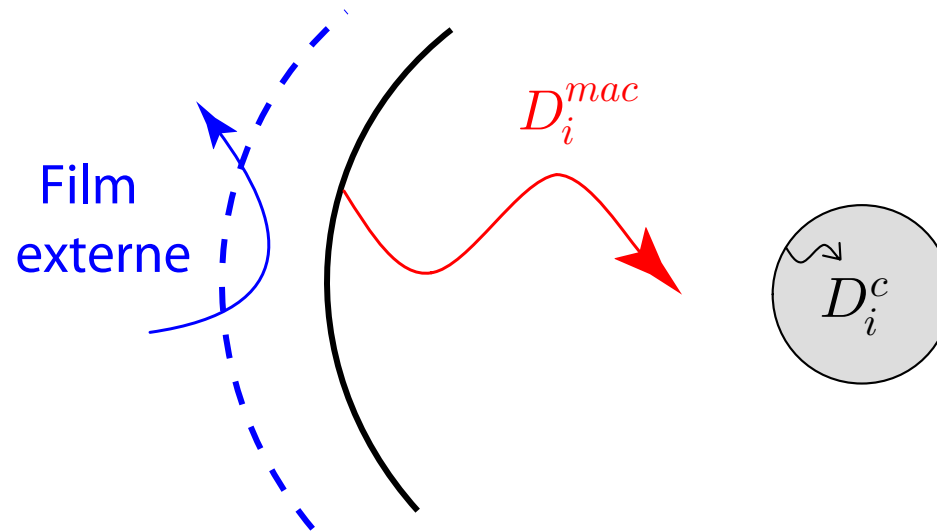
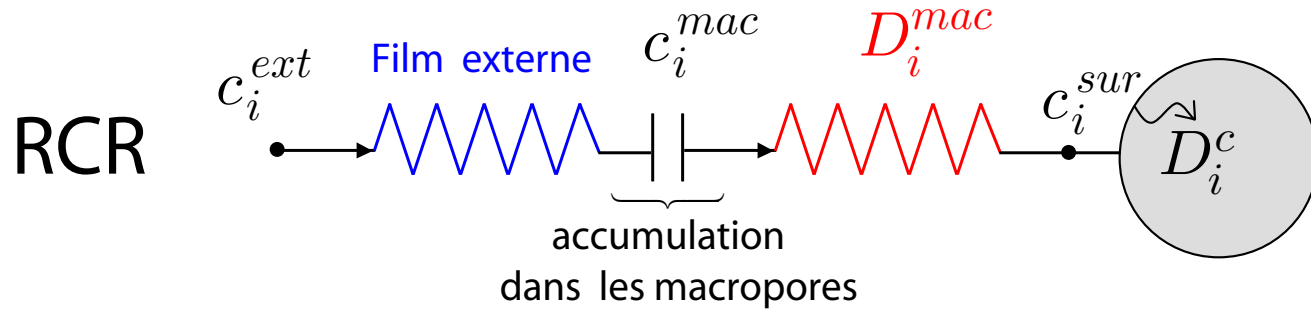
Modèle multi-échelle

- Différentes échelles
- Modèle de colonne
- Échelle extra-granulaire
- **Échelles intra-granulaires**
- Validation du modèle cinétique
- Validation expérimentale

Modèle à contre-courant

Conclusion

Configurations : analogies électriques



Introduction

Modèle multi-échelle

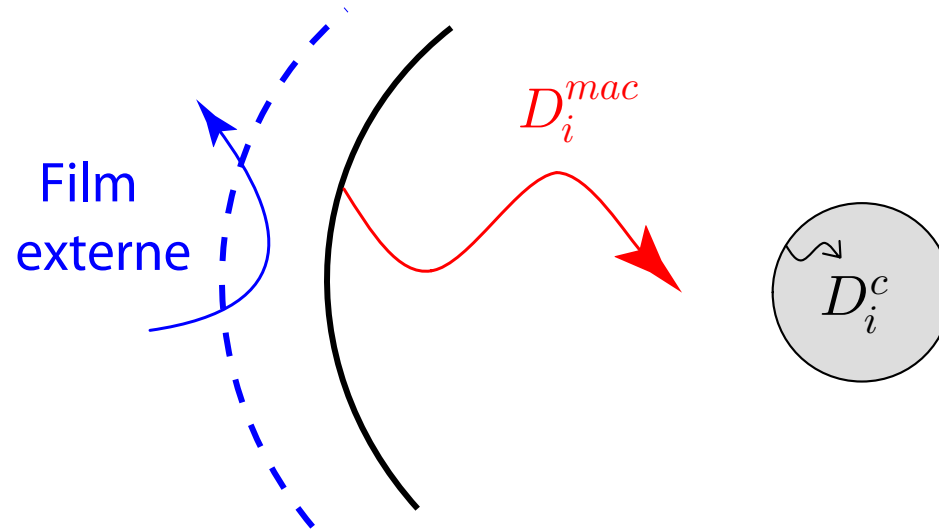
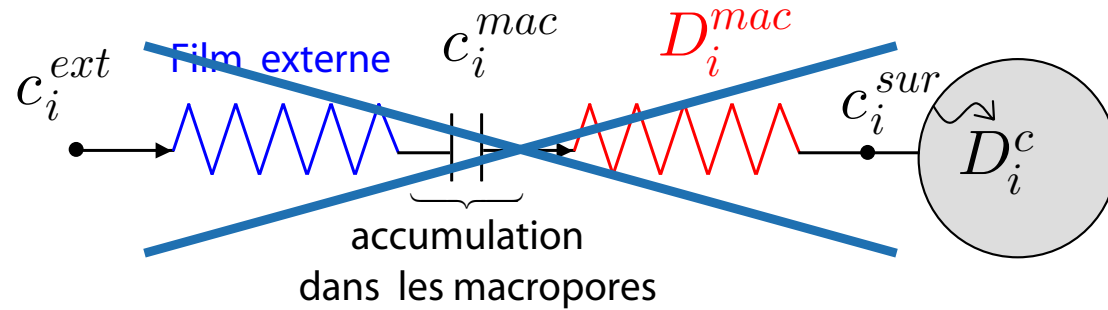
- Différentes échelles
- Modèle de colonne
- Échelle extra-granulaire
- **Échelles intra-granulaires**
- Validation du modèle cinétique
- Validation expérimentale

Modèle à contre-courant

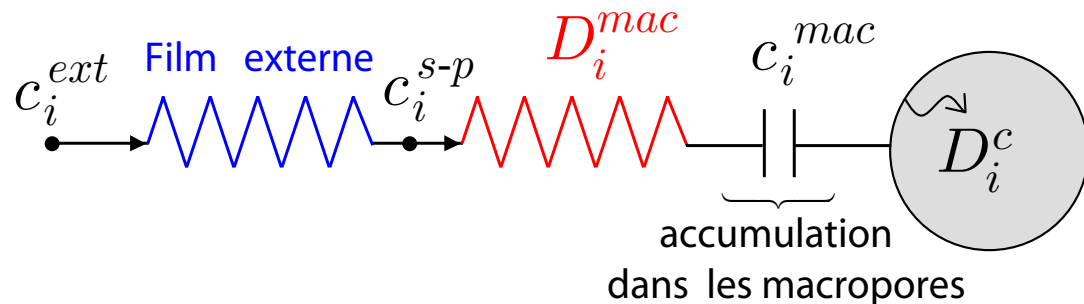
Conclusion

Configurations : analogies électriques

RCR



RRC



Introduction

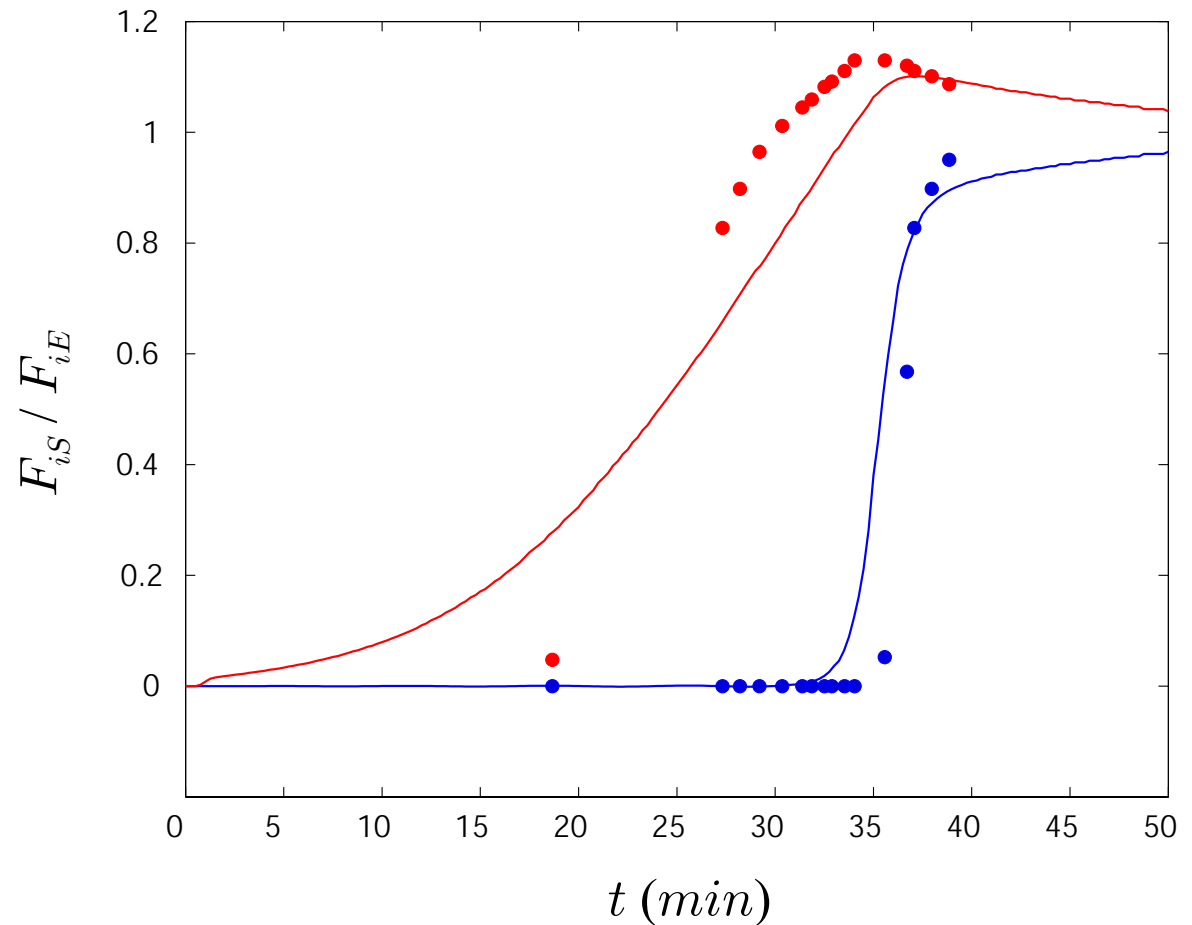
Modèle multi-échelle

- Différentes échelles
- Modèle de colonne
- Échelle extra-granulaire
- **Échelles intra-granulaires**
- Validation du modèle cinétique
- Validation expérimentale

Modèle à contre-courant

Conclusion

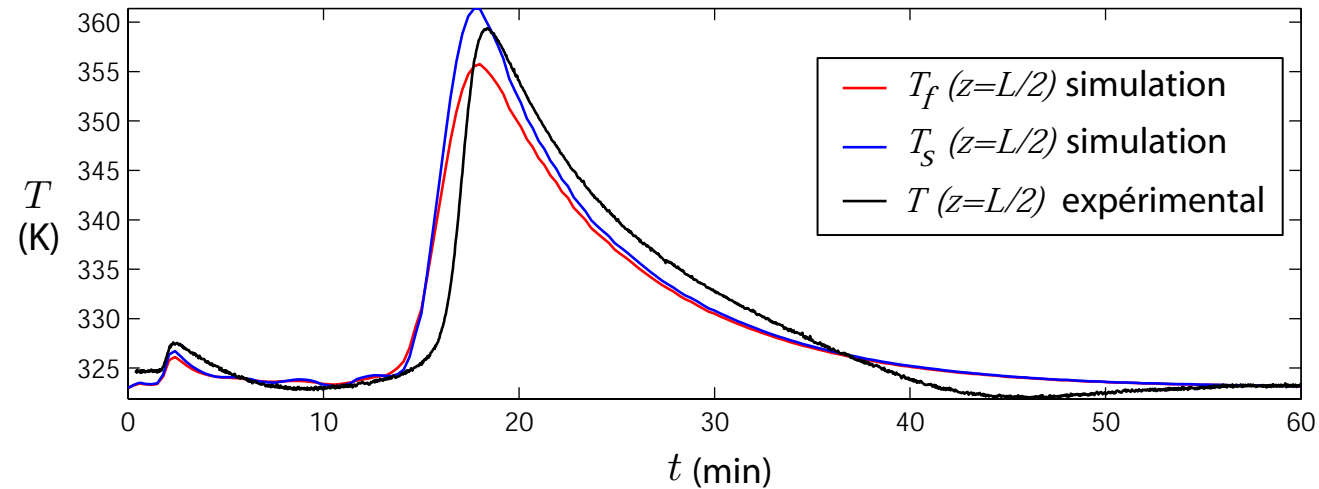
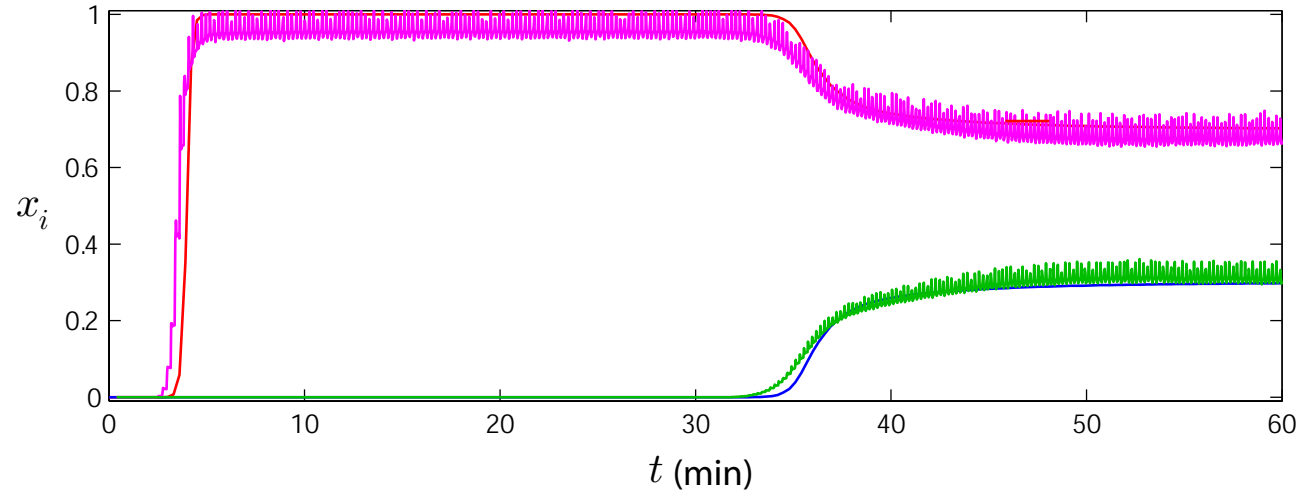
- 2,2-diméthylbutane / 2-méthylpentane sur silicalite
- $C_{22dmb} = 6,76 \text{ mol.m}^{-3}$,
 $C_{2mp} = 5,76 \text{ mol.m}^{-3}$
- $P = 5 \text{ bar}$, $T = 473 \text{ K}$,
 $v_0 = 1,9 \text{ m.s}^{-1}$



Données expérimentales et paramètres de simulation : Jolimaitre (1999)^a

^aJolimaitre, E. (1999). *Étude et modélisation de l'adsorption et du transfert de matière dans les zéolithes de structure MFI*. Thèse de doctorat, Université Lyon 1.

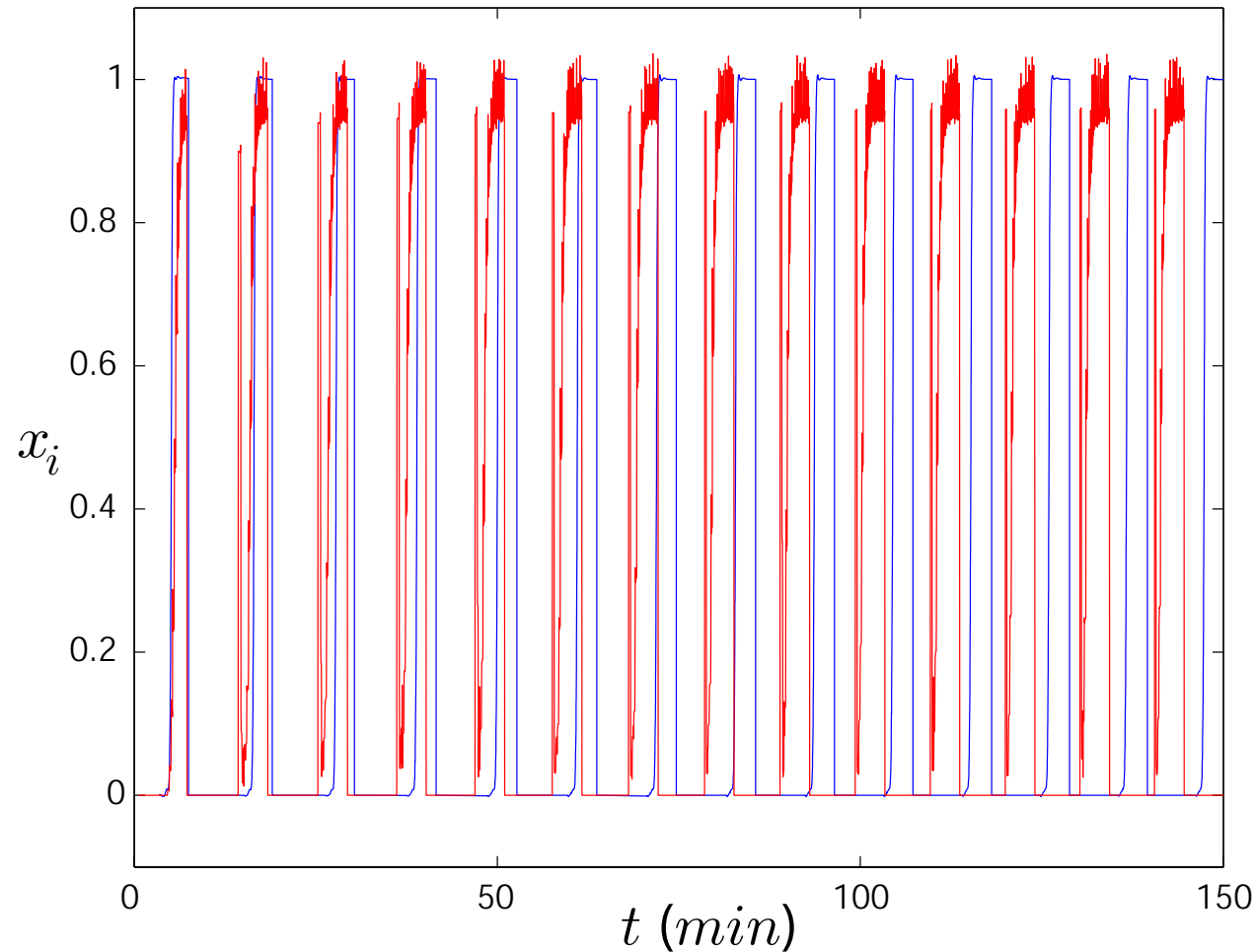
- CH_4/CO_2 (70%/30%)
sur zéolithe 5A
- $P = 3$ bar,
 $T_{f0} = T_{ext} = 323$ K
- $Q_0 = 34 \text{ L.h}^{-1}$ (20°C ,
1 atm)
- Colonne initialement
remplie de N_2



Différents paramètres ont été estimés (équilibre, transfert, etc. . .)

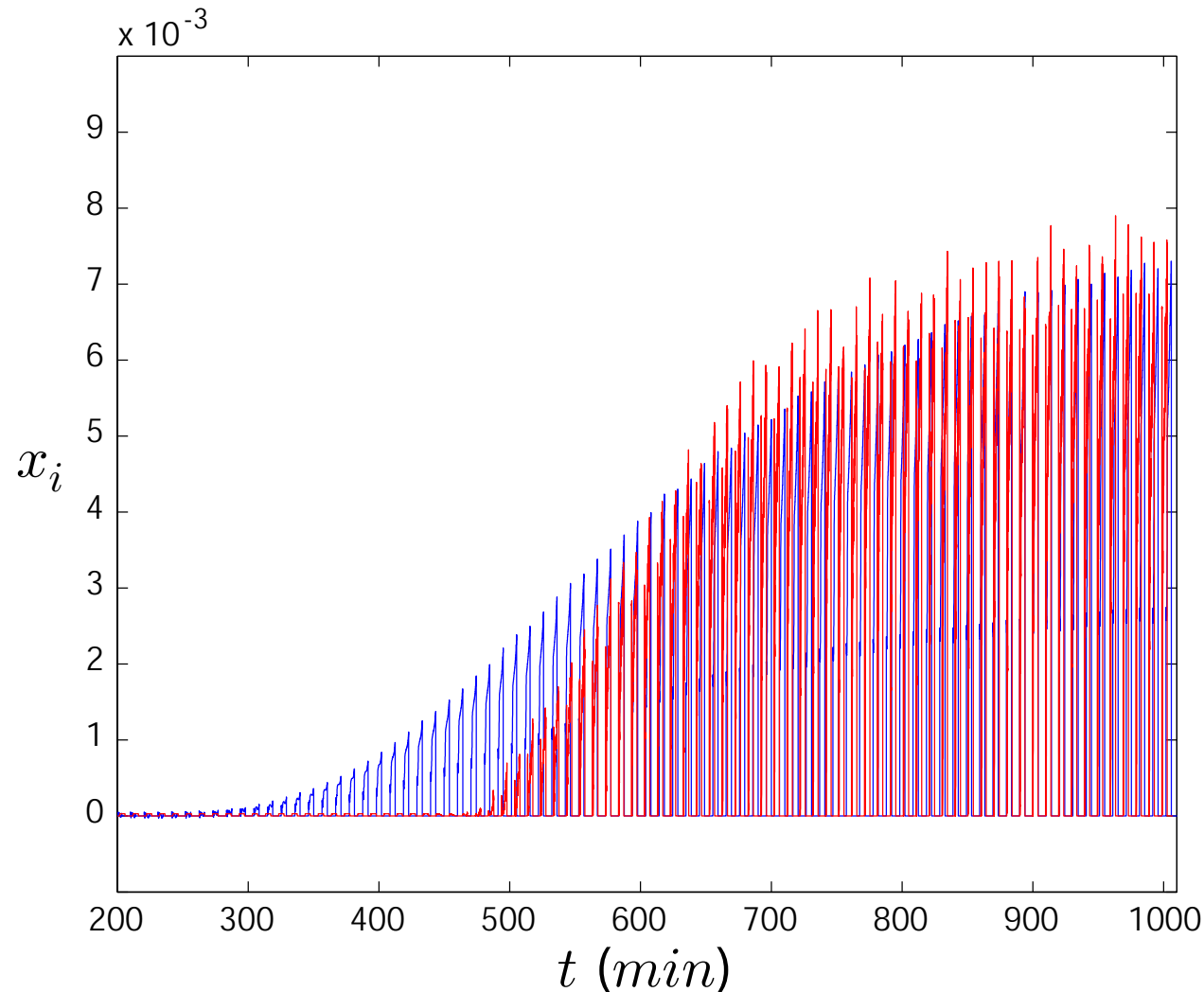
- CH₄/CO₂ (73%/27%) sur zéolithe 5A
- Cycle de Skarstrom sans recyclage
- $P_H = 5, 13$ bar,
 $P_L = 1, 05$ bar
- $\Delta t^{ads} = \Delta t^{des} = 240$ s,
 $\Delta t^{depress} = 20$ s
- $Q_0 = 34$ L.h⁻¹ (20°C,
1 atm)
- $\alpha = 1, 73$
- $T_{f0} = 323$ K, $T_{ext} = 328$ K
- Colonne initialement remplie de N₂

x_{CH_4} expérimental x_{CH_4} simulation



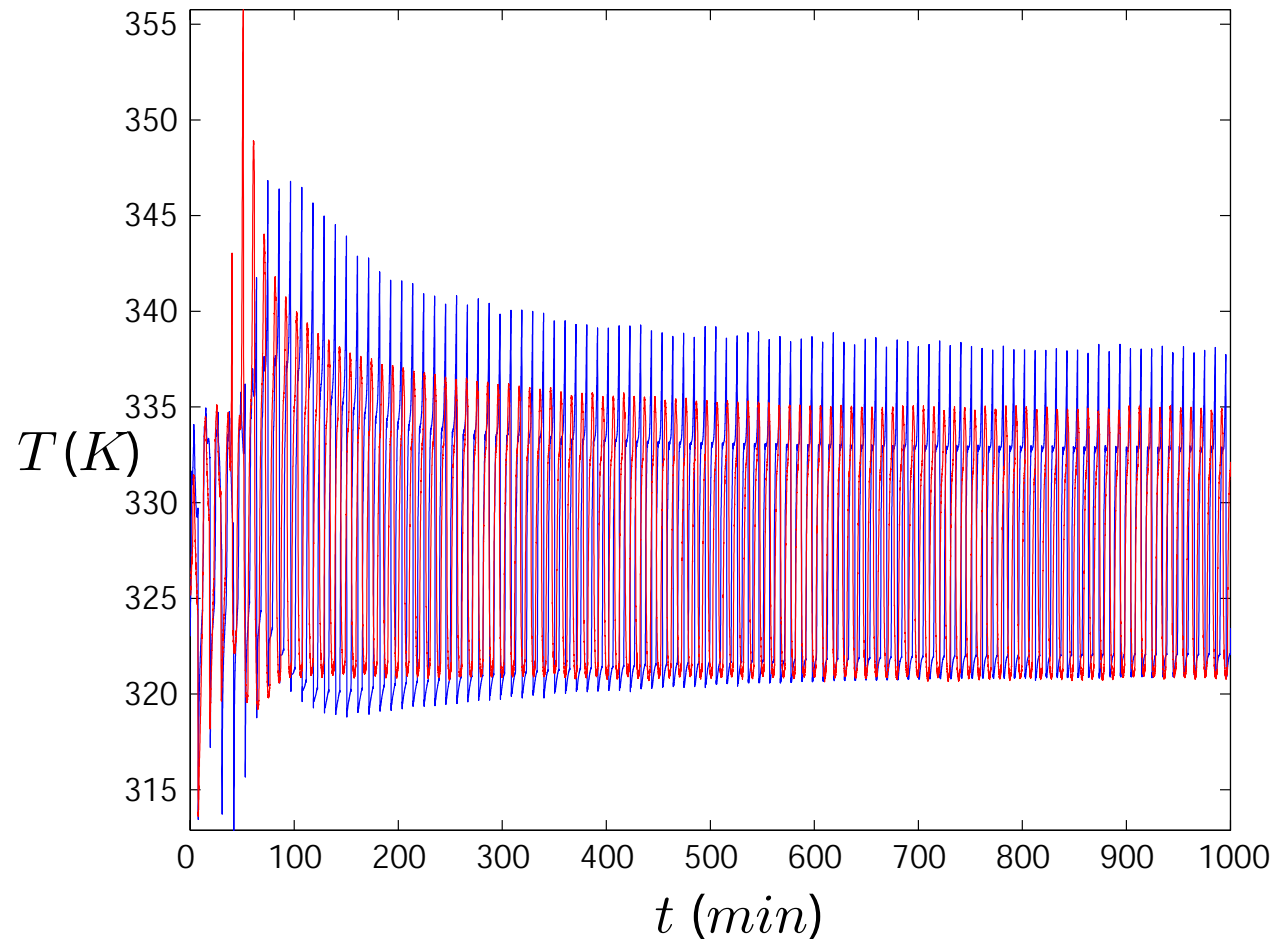
- CH₄/CO₂ (73%/27%) sur zéolithe 5A
- Cycle de Skarstrom sans recyclage
- $P_H = 5,13$ bar,
 $P_L = 1,05$ bar
- $\Delta t^{ads} = \Delta t^{des} = 240$ s,
 $\Delta t^{depress} = 20$ s
- $Q_0 = 34$ L.h⁻¹ (20°C,
1 atm)
- $\alpha = 1,73$
- $T_{f0} = 323$ K, $T_{ext} = 328$ K
- Colonne initialement remplie de N₂

x_{CO_2} expérimental x_{CO_2} simulation



- CH₄/CO₂ (73%/27%) sur zéolithe 5A
- Cycle de Skarstrom sans recyclage
- $P_H = 5,13$ bar,
 $P_L = 1,05$ bar
- $\Delta t^{ads} = \Delta t^{des} = 240$ s,
 $\Delta t^{depress} = 20$ s
- $Q_0 = 34$ L.h⁻¹ (20°C,
1 atm)
- $\alpha = 1,73$
- $T_{f0} = 323$ K, $T_{ext} = 328$ K
- Colonne initialement remplie de N₂

T expérimental T_f simulation



Introduction

Modèle
multi-échelle

Modèle à
contre-courant

- Principe
- Validation
- Dynamique

Conclusion

Approximation du procédé cyclique par un système continu à contre-courant

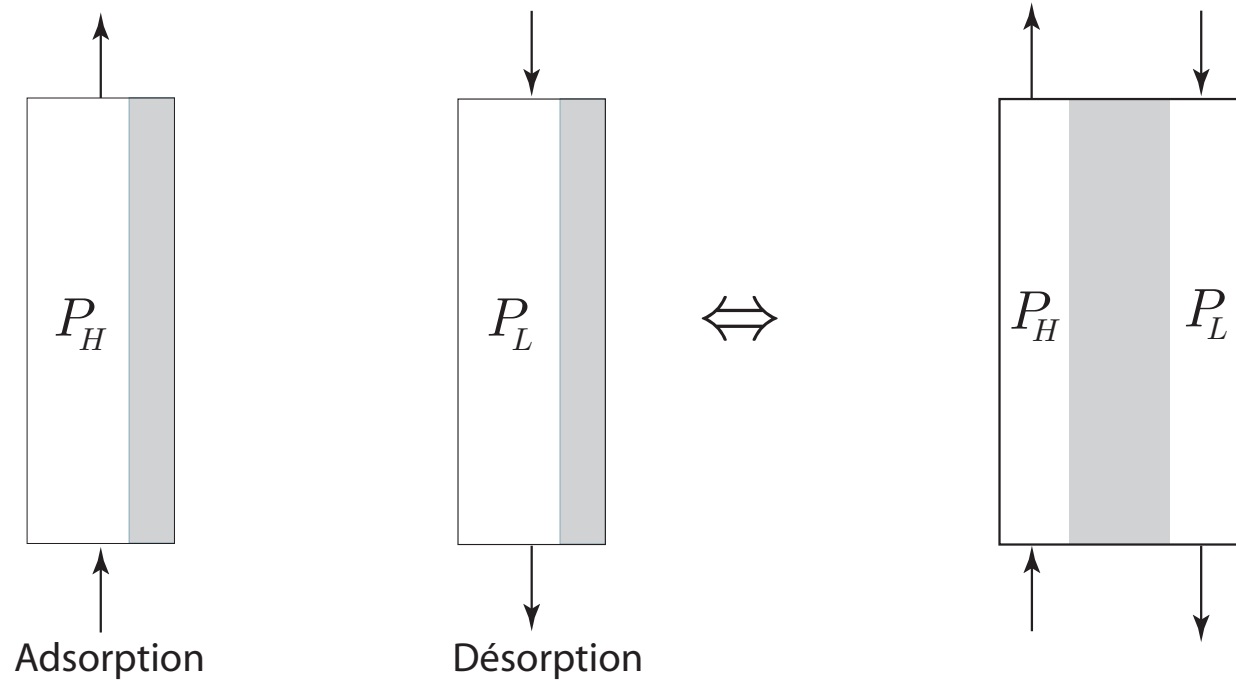
Introduction

Modèle multi-échelle

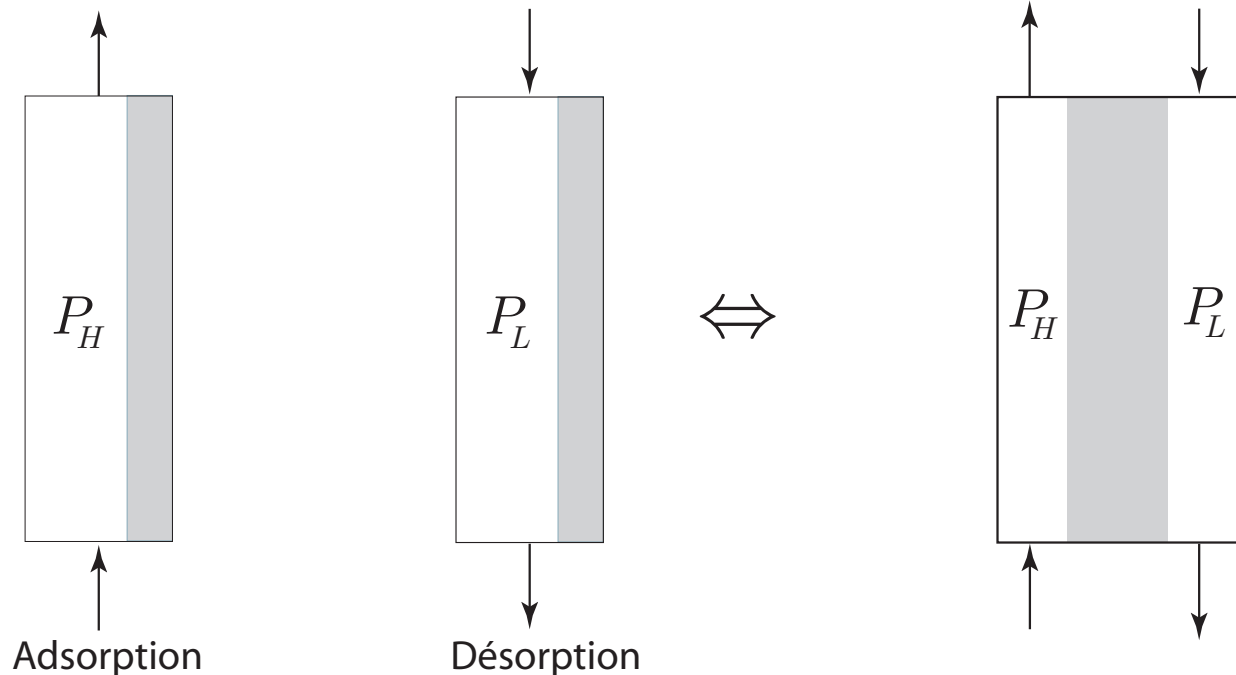
Modèle à contre-courant

- Principe
- Validation
- Dynamique

Conclusion



Suzuki, M. (1985). *A.I.Ch.E. Symp. Series*, 81(242):67-73.



Durée de cycle infiniment courte \Rightarrow profils stationnaires

\Rightarrow PSA = CCF

Approximation valide uniquement pour des séparations cinétiques.

Modèle amélioré

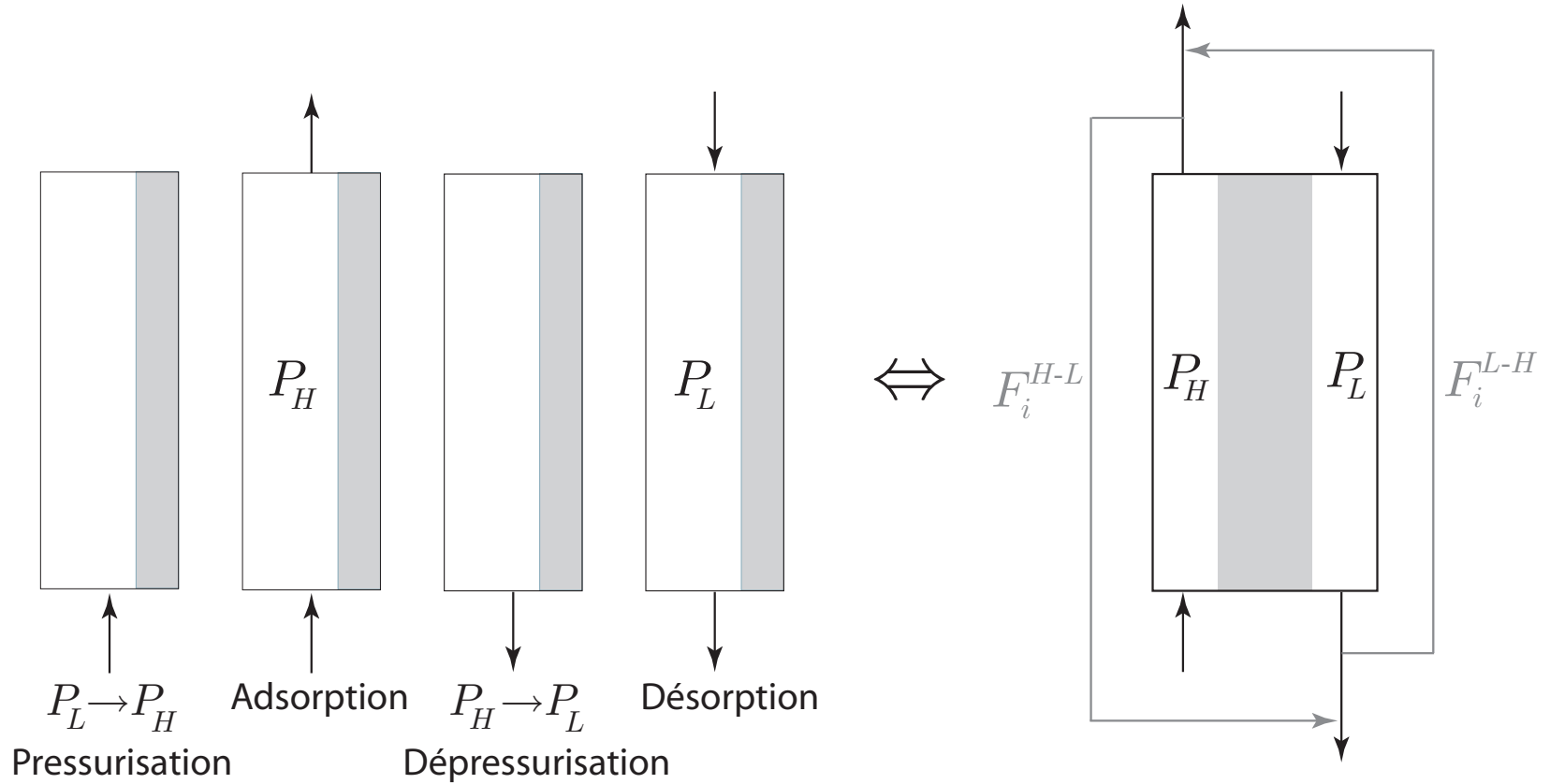
Introduction

Modèle multi-échelle

Modèle à contre-courant

- Principe
- Validation
- Dynamique

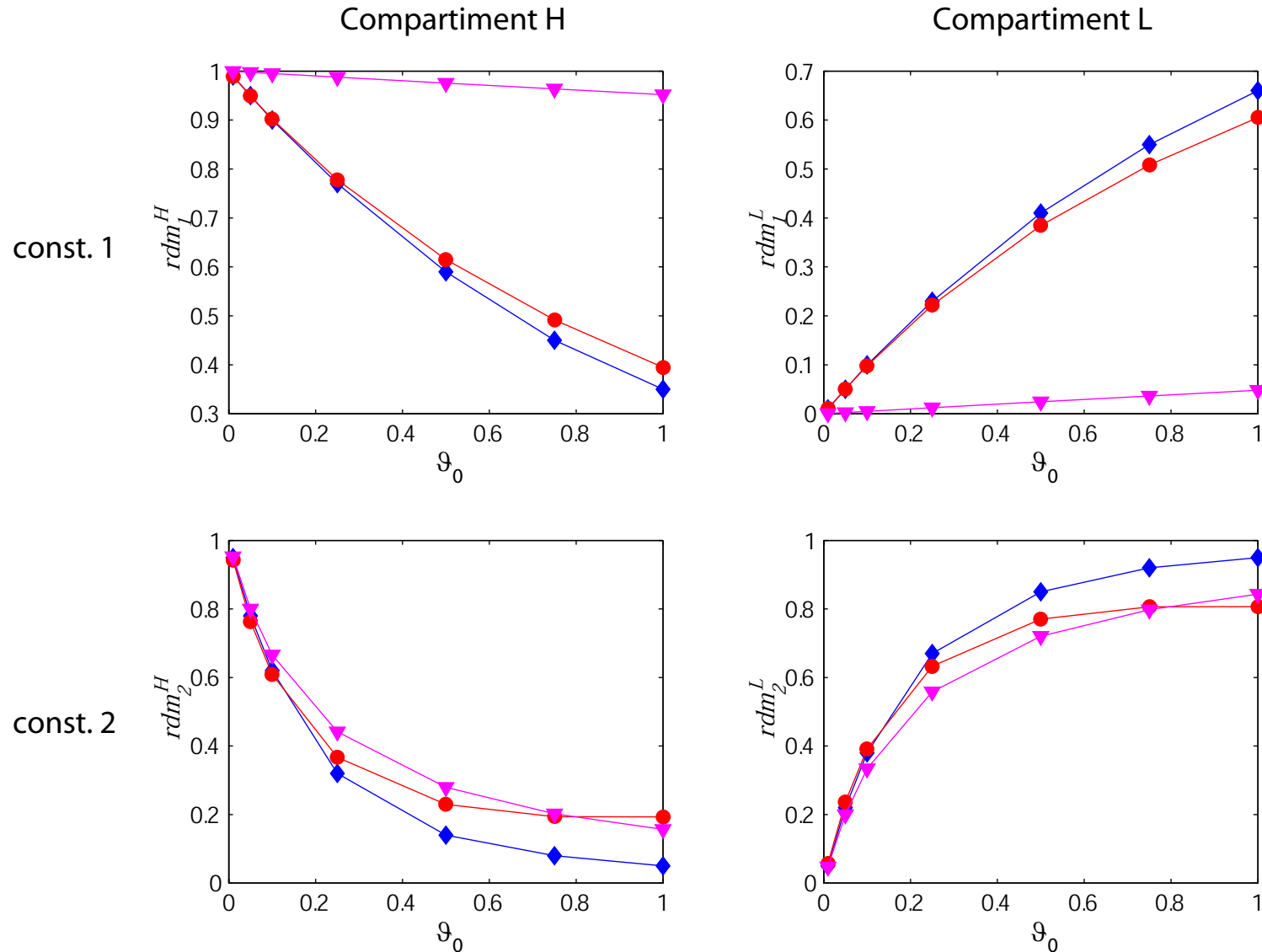
Conclusion



PSA cyclique
CCF Suzuki
CCF lagep

$$\vartheta_0 \equiv \frac{\tau_{\text{passage}}}{\Delta t_{\text{ads}}}$$

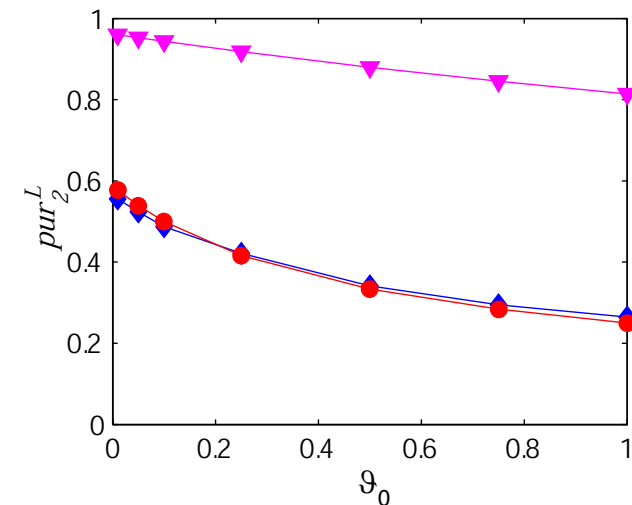
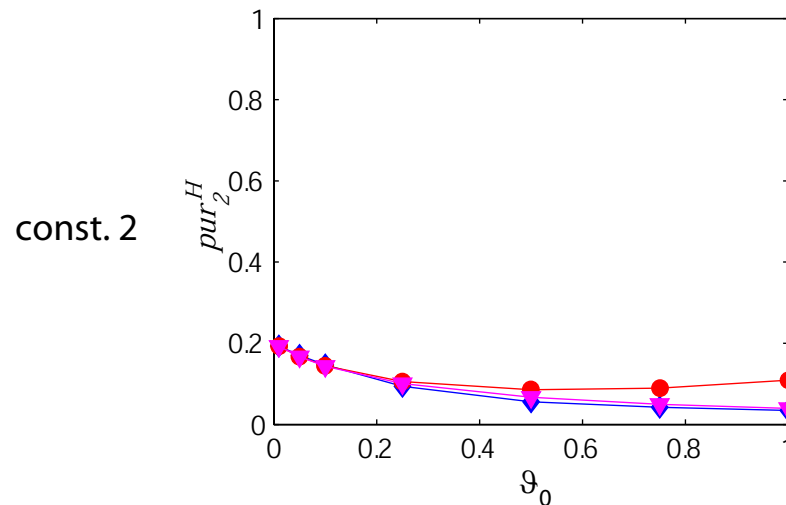
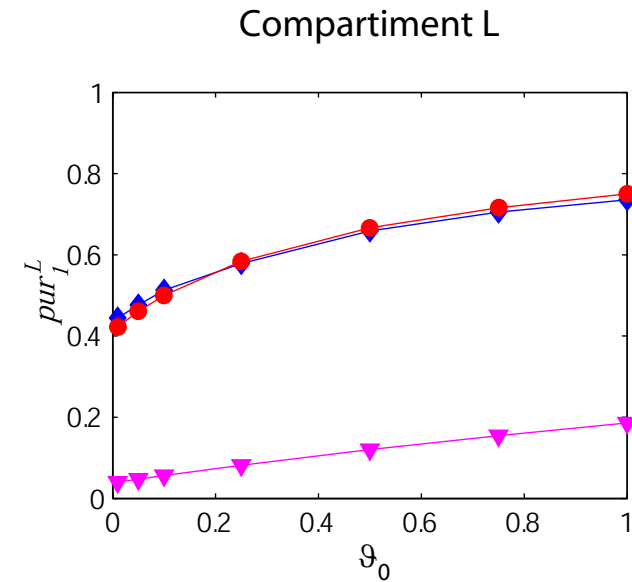
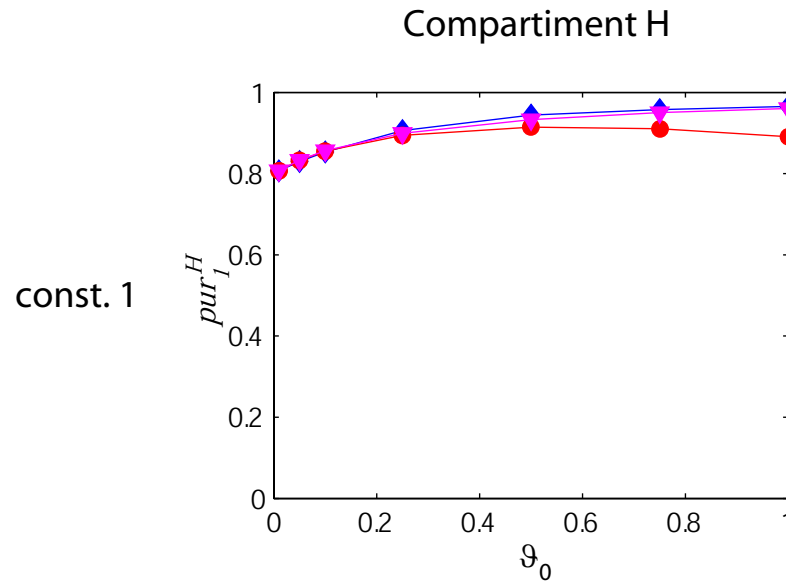
- Conditions isothermes
- Adsorbant monodisperse



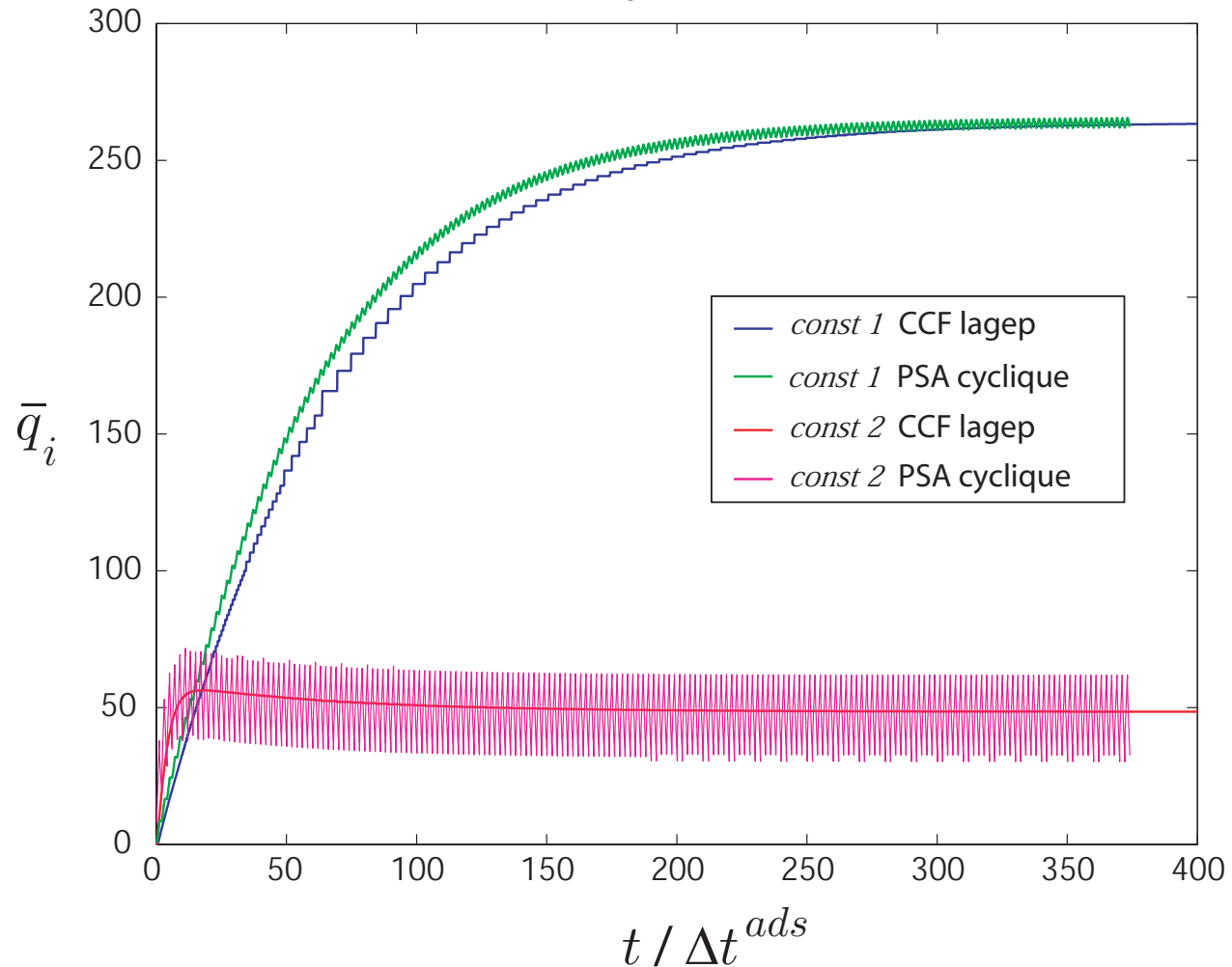
PSA cyclique
CCF Suzuki
CCF lagep

$$\vartheta_0 \equiv \frac{\tau_{\text{passage}}}{\Delta t_{\text{ads}}}$$

- Conditions isothermes
- Adsorbant monodisperse



$$\vartheta_0 = 0,5$$



Introduction

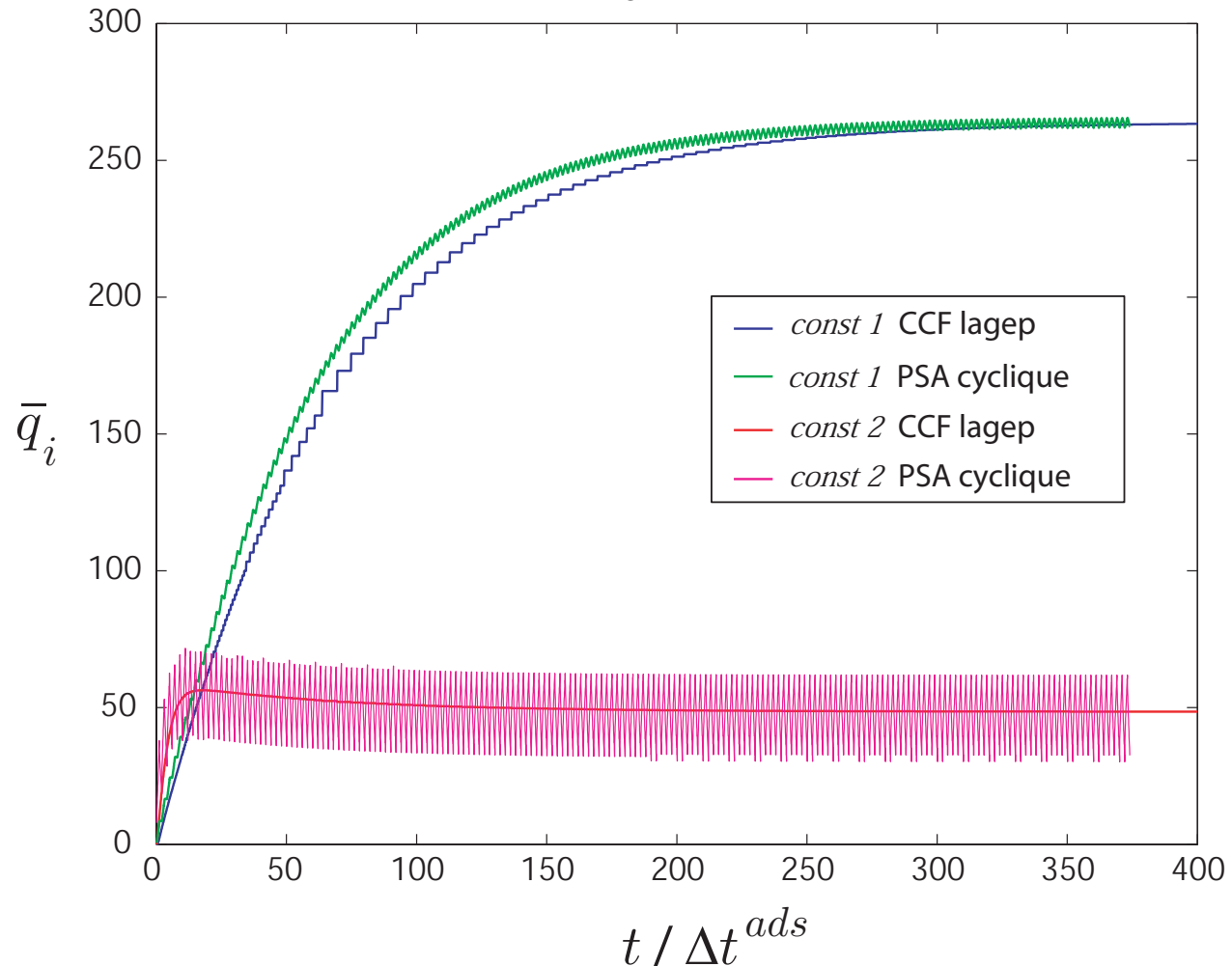
Modèle multi-échelle

Modèle à contre-courant

- Principe
- Validation
- **Dynamique**

Conclusion

$$\vartheta_0 = 0,5$$



- durée simulation PSA cyclique ≈ 10 min
- durée simulation CCF ≈ 5 s

Introduction

Modèle
multi-échelle

Modèle à
contre-courant

Conclusion

- Pilote
- Modèle
multi-échelle
- Modèle CCF

Conclusion et Perspectives

Conclusion et Perspectives : pilote

Introduction

Modèle
multi-échelle

Modèle à
contre-courant

Conclusion

- Pilote
- Modèle
multi-échelle
- Modèle CCF

Conception et mise en œuvre d'un pilote :

- modulable
- suivi en ligne des compositions de sortie et des températures
- contrôle et acquisition informatisés

Conclusion et Perspectives : pilote

Introduction

Modèle
multi-échelle

Modèle à
contre-courant

Conclusion

- **Pilote**
- Modèle
multi-échelle
- Modèle CCF

Conception et mise en œuvre d'un pilote :

- modulable
- suivi en ligne des compositions de sortie et des températures
- contrôle et acquisition informatisés

Perspectives : tester des lois de commande

Conclusion et Perspectives : modèle multi-échelle

Développement d'un modèle simplifié adapté aussi bien aux séparations cinétiques que thermodynamiques \Rightarrow temps de calculs réduits.

- prise en compte d'un flux convectif à travers le film externe

Introduction

Modèle multi-échelle

Modèle à contre-courant

Conclusion

- Pilote
- **Modèle multi-échelle**
- Modèle CCF

Conclusion et Perspectives : modèle multi-échelle

Développement d'un modèle simplifié adapté aussi bien aux séparations cinétiques que thermodynamiques \Rightarrow temps de calculs réduits.

- prise en compte d'un flux convectif à travers le film externe
- modélisation d'un grain bidisperse :
 - ✦ localisation spatiale des résistances au transfert de matière
 - ✦ changement de variable d'état décrivant la phase adsorbée
 - ✦ simplification du modèle intra-cristalin

Introduction

Modèle multi-échelle

Modèle à contre-courant

Conclusion

- Pilote
- **Modèle multi-échelle**
- Modèle CCF

Conclusion et Perspectives : modèle multi-échelle

Développement d'un modèle simplifié adapté aussi bien aux séparations cinétiques que thermodynamiques \Rightarrow temps de calculs réduits.

- prise en compte d'un flux convectif à travers le film externe
- modélisation d'un grain bidisperse :
 - ✦ localisation spatiale des résistances au transfert de matière
 - ✦ changement de variable d'état décrivant la phase adsorbée
 - ✦ simplification du modèle intra-cristalin
- modèle validé expérimentalement (perçages et PSA)

Introduction

Modèle multi-échelle

Modèle à contre-courant

Conclusion

- Pilote
- **Modèle multi-échelle**
- Modèle CCF

Conclusion et Perspectives : modèle CCF

Amélioration du modèle de Suzuki : prise en compte des étapes à pression variable à l'aide de flux de court-circuit :

- bonne estimation des performances du procédé cyclique en régime établi
- bonne représentation de la dynamique globale du procédé cyclique
- résolution très rapide.

Introduction

Modèle multi-échelle

Modèle à contre-courant

Conclusion

- Pilote
- Modèle multi-échelle
- **Modèle CCF**

Conclusion et Perspectives : modèle CCF

Amélioration du modèle de Suzuki : prise en compte des étapes à pression variable à l'aide de flux de court-circuit :

- bonne estimation des performances du procédé cyclique en régime établi
- bonne représentation de la dynamique globale du procédé cyclique
- résolution très rapide.

Perspectives :

- meilleure compréhension des différents paramètres
- prise en compte des variations de température
- modélisation du transfert dans des adsorbants bidisperses
- contrôle d'un procédé PSA.

Introduction

Modèle multi-échelle

Modèle à contre-courant

Conclusion

- Pilote
- Modèle multi-échelle
- **Modèle CCF**