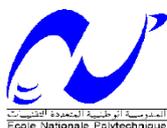


REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
Ministère de L'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Ecole Nationale Polytechnique



LAVALEF

Département de Génie Chimique

Laboratoire de Valorisation des Energies Fossiles

THESE DE DOCTORAT

Présentée par:

Hammouche Ibtissam

Pour l'obtention du grade de docteur D-LMD en Génie chimique

Option : Energie et Développement Durable

Intitulée

**Modélisation et étude paramétrique de l'absorption réactive du CO₂ avec
une solution aqueuse de MEA chargée en CO₂ dans une colonne à
garnissage**

Sous la direction du : Professeur SELATNIA Ammar

Soutenue le : 20/03/2021 à 09:00h au niveau du département GC

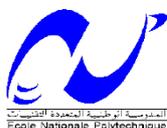
Devant le jury :

Pr. BOUARAB Rabah	ENP	Président
Pr. SELATNIA Ammar	ENP	Directeur de thèse
Pr. BENRACHEDI Khaled	UMBB	Examineur
Dr. ZAATER Sihem	USTHB	Examinatrice
Dr. BENSOUILAH Nadjia	ENP	Examinatrice

Enp 2021

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
Ministère de L'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Ecole Nationale Polytechnique



LAVALEF

Département de Génie Chimique

Laboratoire de Valorisation des Energies Fossiles

THESE DE DOCTORAT

Présentée par:

Hammouche Ibtissam

Pour l'obtention du grade de docteur D-LMD en Génie chimique

Option : Energie et Développement Durable

Intitulée

**Modélisation et étude paramétrique de l'absorption réactive du CO₂ avec
une solution aqueuse de MEA chargée en CO₂ dans une colonne à
garnissage**

Sous la direction du : Professeur SELATNIA Ammar

Soutenue le : 20/03/2021 à 09:00h au niveau du département GC

Devant le jury :

Pr. BOUARAB Rabah	ENP	Président
Pr. SELATNIA Ammar	ENP	Directeur de thèse
Pr. BENRACHEDI Khaled	UMBB	Examineur
Dr. ZAATER Sihem	USTHB	Examinatrice
Dr. BENSOUILAH Nadjia	ENP	Examinatrice

Enp 2021

Remerciement

Je tiens à exprimer toute ma reconnaissance à mes Directeurs de thèse le Professeur Ammar Selatnia et le Professeur Ratiba Derriche. Je vous remercie de m'avoir encadré, orienté, aidé et conseillé.

J'adresse mes sincères remerciements à tous les professeurs, intervenants et toutes les personnes qui par leurs paroles, leurs écrits, leurs conseils et leurs critiques ont guidé mes réflexions et ont accepté à me rencontrer et répondre à mes questions durant mes recherches.

Je remercie le président du jury le Professeur Rabah Bouarab et les examinateurs le Professeur Khaled Benrachedi, le Docteur Sihem Zaater, et le Docteur Nadjia Bensouilah d'avoir accepté d'examiner ce travail.

Toute ma gratitude s'adresse à ma mère (paix à son âme). J'aurais tant aimé que vous soyez présente. «Vous avez tout sacrifié pour vos enfants n'épargnant ni santé ni efforts. Vous m'avez donné un magnifique modèle de labeur et de persévérance. Je suis redevable d'une éducation dont je suis fier ».

Un grand merci à mes proches en particulièrement à mon père, mon mari, et mes enfants qui ont eu à subir le poids de cette surcharge du travail qui a dévoré depuis plusieurs années la majorité de mon temps libre que j'aurai pu leur consacrer pleinement mais qui l'on accepté pour me permettre d'avancer aussi loin que possible dans ce qu'ils savent être une passion.

Je remercie mes frères Bahae Eddine et Aymene, et ma sœur Ibtihel pour leur encouragement.

Je remercie très spécialement Fadila, la secrétaire du département Génie chimique, pour son soutien inconditionnel et son encouragement.

Enfin, je remercie tous mes Ami(e)s que j'aime tant, pour leur sincère amitié et confiance, et à qui je dois ma reconnaissance et mon attachement.

ملخص: تعد النمذجة والمحاكاة الصارمة للممتصات المعبأة أمرًا مهمًا لتصميم عمليات التقاط ثاني أكسيد الكربون بعد الاحتراق. ومن ثم، فإن المعرفة الجيدة والاختيار الحكيم لمعاملات النموذج أمر ضروري لضمان تنبؤات موثوقة. في هذا العمل البحثي، تم تطوير نموذج قائم على المعدل يصف الامتصاص التفاعلي لثاني أكسيد الكربون في محلول مائي أحادي إيثانول أمين في عمود ممتص معبأ بتدفق التيار المعاكس. يأخذ النموذج في الاعتبار تدفقات الكتلة والحرارة عبر الواجهة؛ وبالتالي، تتم موازنة المراحل السائلة والغازية بشكل منفصل. علاوة على ذلك، تم دراسة تأثير خمسة متغيرات مختلفة (النموذج الحركي، عامل التحسين، المحتوى الحراري للامتصاص، انتشار ثاني أكسيد الكربون، وضغط البخار) على أداء العمود. تم التحقق من صحة النموذج المطور بنجاح مقابل البيانات التجريبية المنشورة؛ إلى جانب ذلك، أوضحت هذه الدراسة أن بعض معاملات النموذج لها تأثير كبير على أداء العمود على عكس البعض الآخر. بالإضافة إلى ذلك، تم تحديد الأساليب والارتباطات التي توفر عمومًا تنبؤات أكثر دقة للبيانات التجريبية المتعلقة بالحالات الأخرى المشاركة في هذا البحث لكل معلمة نموذجية.

الكلمات الرئيسية: للممتصات المعبأة؛ نموذج قائم على المعدل؛ امتصاص تفاعلي؛ أحادي إيثانول أمين؛ أداء العمود.

Abstract: Rigorous packed-bed absorber modeling and simulation are significant for post-combustion CO₂ capture processes design. Hence, a good knowledge and judicious selection of model parameters is essential to ensure reliable predictions. In this research work, a rate-based model that describes the reactive absorption of carbon dioxide into loaded aqueous monoethanolamine solution in a countercurrent-flow packed absorber column has been developed. The model considers both mass and heat fluxes across the interface; thus, liquid and gas phases are balanced separately. Furthermore, the effects of five different parameters (kinetic model, enhancement factor, enthalpy of absorption, CO₂ diffusivity, and vapor pressure) on the column performance were investigated. The developed model was successfully validated against published experimental data; besides, this study revealed that some model parameters have a large influence on the column performance, contrary to others. In addition, methods and correlations that generally provide more accurate predictions of the empirical data relative to the other cases involved in this research were determined for each model parameter.

Keywords: packed-bed absorber; rate-based model; reactive absorption; monoethanolamine; column performance.

Résumé : La modélisation et la simulation rigoureuses des absorbeurs à garnissage sont importantes pour la conception des procédés du captage du CO₂ en postcombustion. Par conséquent, une bonne connaissance et une sélection judicieuse des paramètres du modèle sont essentielles pour garantir des prévisions fiables. Dans ce travail de recherche, un modèle basé sur le taux qui décrit l'absorption réactive du dioxyde de carbone avec une solution aqueuse de la monoéthanolamine chargée dans une colonne d'absorption à garnissage à contre-courant a été développé. Le modèle prend en compte les flux de matière et de chaleur à travers l'interface; ainsi, les phases liquide et gazeuse sont équilibrées séparément. En outre, les effets de cinq paramètres différents (modèle cinétique, facteur d'accélération, enthalpie d'absorption, diffusivité du CO₂, et pression de vapeur) sur les performances de la colonne ont été étudiés. Le modèle développé a été validé avec succès par rapport aux données expérimentales; en outre, cette étude a révélé que certains paramètres du modèle ont une grande influence sur les performances de la colonne, contrairement à d'autres. Par ailleurs, les méthodes et les corrélations qui fournissent généralement des prévisions plus précises des données empiriques par rapport aux autres cas impliqués dans cette recherche ont été déterminées pour chaque paramètre du modèle.

Mots clés: absorbeurs à garnissage; modèle basé sur le taux; absorption réactive; monoéthanolamine; performance de la colonne.

TABLE DES MATIERES

LISTE DES ABREVIATIONS ET NOMENCLATURE

LISTE DES FIGURES

LISTE DES TABLEAUX

INTRODUCTION GENERALE	13
I. Etat de l'art	16
I.1. Différentes technologies du CSC	16
I.2. Types des technologies du captage du CO ₂	17
I.2.1. Adsorption	18
I.2.2. Absorption physique	18
I.2.3. Absorption chimique	18
I.2.4. Séparation cryogénique	19
I.2.5. Séparation sur membrane	19
I.3. Solvants chimiques	19
I.3.1. Solvants à base d'amine	20
I.4. Modélisation mathématique de l'absorption chimique du CO ₂ dans une colonne à garnissage	21
II. Formulation du modèle de l'absorption réactive	22
II.1. Bilans massiques et énergétiques	22
II.1.1. Bilans massiques dans la phase gazeuse	24
II.1.2. Bilan de matière total	26
II.1.3. Bilans massiques dans la phase liquide	27
II.1.4. Bilan énergétique dans la phase gazeuse	30
II.1.5. Bilan énergétique dans la phase liquide	32
II.2. Chimie du système CO ₂ -MEA	35
II.2.1. Modèle de spéciation à l'équilibre	35
II.2.2. Modèle cinétique	36
II.2.3. Facteur d'accélération	37
II.2.4. Compositions interfaciales	37
III. Paramètres du modèle	39
III.1. Propriétés de la phase liquide	41
III.1.1. Densité	41
III.1.2. Viscosité	48

III.1.3. Constante d'Henry	52
III.1.4. Diffusivité du CO ₂ dans les solutions aqueuses de MEA	58
III.1.5. Diffusivité de MEA dans l'eau	58
III.1.6. Tension superficielle de la solution aqueuse de MEA chargée en CO ₂	59
III.1.7. Capacité thermique	59
III.1.8. Enthalpie d'absorption du CO ₂ dans une solution aqueuse de MEA	60
III.1.9. Enthalpie de vaporisation	61
III.2. Propriétés de la phase gazeuse	61
III.2.1. Densité en phase gazeuse	61
III.2.2. Capacité thermique en phase gazeuse	63
III.2.3. Diffusivités binaires en phase gazeuse	63
III.2.4. Diffusivité du CO ₂ en phase gazeuse	63
III.2.5. Diffusivité de la vapeur d'eau en phase gazeuse	64
III.2.6. Conductivité thermique des gaz purs	64
III.2.7. Conductivité thermique en phase gazeuse	65
III.2.8. Pression de vapeur d'eau	65
III.3. Propriétés du transfert de matière et de chaleur	66
III.3.1. Coefficient du transfert de chaleur en phase gazeuse	66
III.3.2. Coefficient du transfert thermique en phase gazeuse corrigé par le transfert de matière	66
III.3.3. Corrélations du transfert de matière	66
IV. Simulation	68
IV.1. Programme informatique du modèle de la colonne d'absorption	68
IV.2. Cas d'étude expérimentale	70
IV.2.1. Description de la colonne	70
IV.2.2. Résultats expérimentaux	72
IV.3. Validation du modèle	74
IV.3.1. Profils de température	75
IV.3.2. Profils de la charge du CO ₂ en phase liquide	76
IV.3.3. Profils du dioxyde de carbone et de la vapeur d'eau	77
V. Etude paramétrique	79
V.1. Aperçu général sur les paramètres du modèle étudiés dans ce travail	81
V.1.1. Modèle cinétique	81
V.1.2. Facteur d'accélération	82

V.1.3. Enthalpie d'absorption	84
V.1.4. Pression de vapeur	85
V.1.5. Diffusivité du CO ₂ dans les solutions aqueuses de MEA	85
V.2. Méthodologie	87
V.3. Résultats et discussion	89
V.3.1. Modèle cinétique	91
V.3.2. Facteur d'accélération	93
V.3.3. Enthalpie d'absorption	93
V.3.4. Pression de vapeur	95
V.3.5. Diffusivité du CO ₂ dans les solutions aqueuses de MEA	96
V.4. Valeur ajoutée de cette étude à la modélisation et à la simulation	98
CONCLUSION GENERALE	100
BIBLIOGRAPHIE	102
LISTE DES TRAVAUX DE RECHERCHE EFFECTUES	111

LISTE DES ABREVIATIONS ET NOMENCLATURE

a	Surface interfaciale du transfert de matière par unité du volume du garnissage	m^2/m^3
a_h	Surface hydraulique du garnissage par unité du volume	m^2/m^3
a_p	Surface géométrique du garnissage par unité du volume	m^2/m^3
C_j	Concentration molaire de l'espèce j en phase liquide	mol/m^3
C_L	Constante caractéristique du garnissage en phase liquide	
C_V	Constante caractéristique du garnissage en phase gazeuse	
$C_{j,l}$	Concentration molaire de l'espèce j du côté de l'interface en phase liquide	mol/m^3
$C_{p,G}$	Capacité calorifique molaire en phase gazeuse	$\text{J}/(\text{mol K})$
$C_{p,L}$	Capacité calorifique molaire en phase liquide	$\text{J}/(\text{mol K})$
$C_{p,i}^{(l)}$	Capacité calorifique molaire en phase liquide de l'espèce i	$\text{J}/(\text{mol K})$
$C_{p,i}^{(g)}$	Capacité calorifique molaire en phase gazeuse de l'espèce i	$\text{J}/(\text{mol K})$
d_h	Diamètre hydraulique du garnissage	m
$D_{i,L}$	Diffusivité de l'espèce i en phase liquide	m^2/s
$D_{i,L}^0$	Diffusivité de l'espèce i dans l'eau	m^2/s
$D_{i,G}$	Diffusivité de l'espèce i en phase gazeuse	m^2/s
D_{ij}	Diffusivité binaire en phase gazeuse	m^2/s
D_R	Diffusivité en phase liquide	m^2/s
E	Facteur d'accélération	
g	Accélération de la gravité	m/s^2
G	Débit molaire de la phase gazeuse par unité de surface de la section transversale	$\text{mol}/(\text{s m}^2)$
G_B	Débit molaire du gaz porteur B par unité de surface de la section transversale	$\text{mol}/(\text{s m}^2)$
Ha	Nombre d'Hatta	
h_G	Coefficient du transfert de chaleur convective en phase gazeuse	$\text{J}/(\text{s K m}^2)$
h_G^*	Coefficient du transfert de chaleur en phase gazeuse corrigé par le transfert de matière	$\text{J}/(\text{s K m}^2)$
h_L	Rétention du garnissage en phase liquide	
H_L	Enthalpie molaire totale en phase liquide	kJ/mol
H_G	Enthalpie molaire totale en phase gazeuse	kJ/mol
H_j^l	Enthalpie molaire de l'espèce j en phase liquide	kJ/mol
H_j^g	Enthalpie molaire de l'espèce j en phase gazeuse	kJ/mol
k_2	Constante de la vitesse de réaction du second ordre	$\text{m}^3/(\text{kmol s})$
$k_{G,i}$	Coefficient de transfert de matière du côté du gaz du composant i	$\text{kmol}/(\text{kPa m}^2 \text{ s})$
$k_{L,A}^0$	Coefficient ordinaire du transfert de matière de l'espèce A en phase liquide	m/s
$k_{L,A}$	Coefficient amélioré du transfert de matière de l'espèce A en phase liquide	m/s
L	Débit molaire en phase liquide par unité de surface de la section transversale	$\text{mol}/(\text{s m}^2)$
M_G	Masse molaire de la phase gazeuse	kg/mol
M_i	Masse molaire de l'espèce i	kg/mol
M_L	Masse molaire de la phase liquide	kg/mol
P	Pression totale en phase gazeuse	Pa
P_S^{sat}	Pression de vapeur saturante de l'espèce S	Pa
q_G	Flux du transfert de chaleur convectif interphase	W/m^2

q_G^*	Flux du transfert de chaleur corrigé par le transfert de masse	W/m ²
R	Constante universelle des gaz	J/mol.K
T_0	Température de référence	298.15K
T_G	Température en phase gazeuse	K
T_L	Température en phase liquide	K
v_L	Vitesse superficielle de la phase liquide	m/s
v_G	Vitesse superficielle de la phase gazeuse	m/s
x_i	Fraction molaire de l'espèce i dans le liquide en vrac	
$x_{i,l}$	Fraction molaire de l'espèce i du côté de l'interface en phase liquide	
X_i	Rapport molaire en phase liquide de l'espèce i (par rapport au CO ₂ libre en solution)	
Y_i	Rapport molaire en phase gazeuse de l'espèce i (par rapport au gaz porteur B)	
y_i	Fraction molaire de l'espèce i dans la phase gazeuse en vrac	
$y_{i,l}$	Fraction molaire de l'espèce i du côté de l'interface en phase gazeuse	
w_i	Fraction massique de l'espèce i dans le liquide en vrac	
z	Hauteur de la colonne	m
Z_c	Facteur de compressibilité dans la phase gazeuse	
$\Delta H_{rx}^{(abs)}$	Enthalpie molaire de l'absorption réactive du CO ₂	kJ/mol du CO ₂
$\Delta H_{vap,S}$	Enthalpie molaire de la vaporisation de l'eau	J/mol

Les symboles grecs

α_{CO_2}	Charge du CO ₂ en phase liquide	mole CO ₂ /mole MEA
ε	Fraction du vide du garnissage	
γ_S	Coefficient d'activité de l'eau en phase liquide	
η_G	Viscosité dynamique de la phase gazeuse	Pa.s
η_L	Viscosité dynamique de la phase liquide	Pa.s
ρ_G	Densité massique de la phase gazeuse	kg/m ³
ρ_L	Densité massique de la phase liquide	kg/m ³
ρ_i	Densité massique de l'espèce i dans le liquide	kg/m ³
ρ'_G	Densité molaire de la phase gazeuse	mol/m ³
ρ'_L	Densité molaire de la phase liquide	mol/m ³
ν	Coefficient stœchiométrique	
σ_L	Tension superficielle de la phase liquide	J/m ²
Ω_{MEA}	pourcentage massique de MEA dans la solution	% en poids
ω	Facteur acentrique	

Les indices

A	Dioxyde de carbone
ERM%	Pourcentage d'écart relatif moyen
B	Gaz porteur
P	Ion carbamate
Q	MEA protoné
MEA	Monoéthanolamine
R	MEA
S	Vapeur d'eau

LISTE DES FIGURES

Figure 1. Schéma d'un procédé du captage du CO ₂ en post-combustion	16
Figure 2. Schéma d'un procédé du captage du CO ₂ en pré-combustion.....	17
Figure 3. Schéma d'un procédé du captage du CO ₂ en combustion par oxy-combustible	17
Figure 4. Élément infinitésimal d'une colonne absorbante garnie	23
Figure 5. Comparaison entre les différentes corrélations de la densité de MEA pure	42
Figure 6. Comparaison entre les différentes corrélations de la densité de l'eau.....	43
Figure 7. Agrandissement de la figure 6 pour la comparaison entre les corrélations de la densité de l'eau	44
Figure 8. Comparaison entre les différentes corrélations de la densité d'une solution aqueuse de MEA chargée en CO ₂ à 298,15 K et 30% en poids.....	46
Figure 9. Comparaison entre les différentes corrélations de la densité d'une solution aqueuse de MEA chargée en CO ₂ à 313,15 K et 30% en poids.....	47
Figure 10. Comparaison entre les différentes corrélations de la densité d'une solution aqueuse de MEA chargée en CO ₂ avec $\alpha = 0,1$ et à 30% en poids	48
Figure 11. Comparaison entre les corrélations de la viscosité de l'eau	49
Figure 12. Comparaison entre les viscosités mesurées et calculés dans une solution aqueuse de MEA chargée en CO ₂ avec 30% en poids à (298,15K, 313,15K, 323,15K, 343,15K et 353,15K).....	51
Figure 13. Comparaison entre les viscosités mesurées et calculés dans une solution aqueuse de MEA chargée en CO ₂ avec $\alpha = 0,1$ et à (20, 30 and 40)% en poids.....	51
Figure 14. Comparaison entre les corrélations permettant le calcul des constantes d'Henry du CO ₂ dans l'eau	54
Figure 15. Comparaison entre les corrélations permettant le calcul de la constantes d'Henry du N ₂ O dans l'eau	55
Figure 16. Comparaison entre les corrélations permettant le calcul de la constantes d'Henry du N ₂ O dans une solution aqueuse de MEA à 313,15 K.....	56
Figure 17. Comparaison entre les corrélations permettant le calcul des constantes d'Henry du N ₂ O dans une solution aqueuse de MEA à 30% en poids.....	57
Figure 18. Organigramme de la simulation du modèle.....	69
Figure 19. Schéma simplifié de la tuyauterie et de l'instrumentation de l'unité d'absorption du CO ₂ à l'échelle pilote	71
Figure 20. Profils des températures en phase liquide et gazeuse le long de la hauteur de l'absorbeur pour les deux essais R 22 et R 23. Cercles remplis : données expérimentales ; lignes courbes pleines et pointillées : résultats de simulation pour les températures de la phase liquide et de la phase gazeuse, respectivement	76
Figure 21. Profils de la charge du CO ₂ en phase liquide le long de la hauteur de l'absorbeur pour les deux essais R 22 et R 23. Cercles remplis: données expérimentales; lignes pleines: résultats de la simulation	77
Figure 22. Profils des fractions molaires du dioxyde de carbone et de la vapeur d'eau en phase gazeuse le long de la hauteur de l'absorbeur pour les deux essais R 22 et R 23. Cercles remplis: données expérimentales; lignes pleines: résultats de la simulation.....	78

Figure 23. Résultats de la simulation obtenus à l'aide de différents modèles cinétiques : (a) Luo et al. (2015) et (b) Aboudheir et al. (2003)	92
Figure 24. Résultats de la simulation obtenus en utilisant différentes approches de l'enthalpie d'absorption : (a) Kohl et Nielsen (1997), (b) Pandya (1983), (c) Kim (2009), (d) Llano-Restrepo et Araujo-Lopez (2015) sur la base des données de Kim et Svendsen (2007), et (e) Llano-Restrepo et Araujo-Lopez (2015) sur la base des données d'Arcis et al. (2011).....	94
Figure 25. Résultats de la simulation obtenus en employant différents corrélations de la pression de vapeur : (a) Antoine (1888), (b) Riedel (1954), et (c) Ambrose et Walton (1989)	95
Figure 26. Résultats de la simulation obtenus en utilisant différentes corrélations pour le calcul de la diffusivité du CO ₂ en solution aqueuse de MEA : (a) Ko et al. (2001), (b) Jamel (2002) et (d) Ying et Eimer (2012)	97
Figure 27. Résultats de la comparaison pour les essais (R 3, 8, 13-15, 18, 21-23) de Sonderby et al. (2013)	99

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 1. Liste des corrélations utilisées dans la présente étude pour l'estimation des propriétés physico-chimiques et du transfert.	40
Tableau 2. Résumé des corrélations de la densité de MEA pure	41
Tableau 3. Résumé des corrélations de la densité de l'eau	43
Tableau 4. Résumé des corrélations de la densité des solutions aqueuses de MEA chargées en CO ₂	45
Tableau 5. Résumé des corrélations de la viscosité de l'eau	48
Tableau 6. Résumé des corrélations de la viscosité des solutions aqueuses de MEA chargées en CO ₂	50
Tableau 7. Résumé des corrélations de constante d'Henry du CO ₂ et du N ₂ O dans l'eau	53
Tableau 8. Résumé des corrélations de la constante d'Henry du N ₂ O dans les solutions aqueuses de MEA	56
Tableau 9. Résumé des corrélations de la diffusivité du CO ₂ et du N ₂ O dans l'eau et la diffusivité du N ₂ O dans les solutions aqueuses de MEA	58
Tableau 10. Corrélation permettant le calcul de la diffusivité de MEA dans l'eau	59
Tableau 11. Corrélation permettant le calcul de la tension superficielle des solutions aqueuses de MEA partiellement carbonatées	59
Tableau 12. Corrélation permettant le calcul de la capacité thermique dans des solutions aqueuses de MEA partiellement carbonatées	60
Tableau 13. Corrélation permettant le calcul de l'enthalpie d'absorption dans une solution aqueuse de MEA partiellement carbonatée	61
Tableau 14. Corrélation permettant le calcul de l'enthalpie de vaporisation dans une solution aqueuse de MEA partiellement carbonatée	61
Tableau 15. Paramètres des composants purs utilisés dans l'équation d'état PSRK	62
Tableau 16. Coefficients de l'Eq (III.13)	63
Tableau 17. Valeurs de $\sum v$ des composants purs	63
Tableau 18. Conditions opératoires	72
Tableau 19. Températures moyennes dans le système pendant le fonctionnement en régime permanent.	73
Tableau 20. Charges du CO ₂ moyennes dans le système pendant le fonctionnement en régime permanent	74
Tableau 21. Résumé des modèles cinétiques	81
Tableau 22. Résumé des modèles des facteurs d'accélération	82
Tableau 23. Résumé des corrélations de l'enthalpie d'absorption et des valeurs fixes	84
Tableau 24. Résumé des corrélations de la pression de vapeur	85
Tableau 25. Liste des corrélations de la diffusivité du CO ₂ dans une solution aqueuse de MEA	86
Tableau 26. Résumé des corrélations utilisées pour le calcul des paramètres du modèle dans chaque cas.	87
Tableau 27. Résultats de la simulation pour les essais (R 3, 8, 13-15, 18, 21-23) de Sonderby et al. (2013)	89

Tableau 28. Liste des corrélations des paramètres du modèle utilisés dans chaque cas 98

INTRODUCTION GENERALE

La commission intergouvernementale sur les changements climatiques ([Climate Change, 2014](#)) a affirmé que le réchauffement climatique est devenu le problème climatique le plus grave du siècle dernier. Des efforts importants ont été fournis pour réduire les émissions des gaz acides provenant des sources industrielles afin d'atténuer ce sérieux problème et de prévenir le changement climatique mondial. Parmi tous les gaz à effet de serre, une attention particulière est accordée au dioxyde du carbone en raison de son influence à long terme sur le climat à cause de sa stabilité chimique qui lui permet de rester dans l'atmosphère pendant de très longues périodes pouvant atteindre des décennies ou des siècles. [Gupta et al., \(2003\)](#) ont démontré que le CO₂ a le plus grand impact sur le réchauffement climatique par rapport aux autres gaz à effet de serre; il a une contribution de 60% comme le rapportent [Moulijn et al., \(2008\)](#). En outre, [IEA \(2016\)](#) a attesté qu'en 2015, la concentration moyenne du CO₂ était supérieure de 40% par rapport à la période préindustrielle. En conséquence, des stratégies efficaces de réduction des émissions du CO₂ telles que le captage et le stockage du carbone (CSC) sont nécessaires pour lutter contre cette tendance

Plusieurs technologies du captage du CO₂ ont été adoptées comme: le captage en post-combustion, le captage en pré-combustion et le captage en oxy-combustible ([Kanniche et al., 2010](#)). Actuellement, le captage en post-combustion par absorption chimique à base d'amines est l'une des technologies du captage les plus prometteuses pour applications à grande échelle en raison de son taux de captage élevé et de sa bonne adaptabilité ([Rochelle, 2009](#) ; [Boot-Handford et al., 2013](#); [Dutcher et al., 2015](#)). Son principe est d'utiliser un solvant alcalin pour réagir et séparer le CO₂ des fumées.

Des progrès remarquables ont été certes accomplis dans ce domaine de recherche ces dernières années. Des nouveaux solvants ont été développés comme les solvants biphasiques qui réduisent considérablement l'énergie de régénération ([Liu et al., 2019](#)) ; ainsi que des additifs à nanoparticules qui peuvent aussi améliorer l'absorption et la désorption du CO₂ ([Wang et al., 2016](#)). Un certain nombre de projets de démonstration ont été achevés, comme le projet d'intégrer le CSC à un barrage au Canada et le projet de Petra Nova en Amérique ([Mantripragada et al., 2019](#)).

Néanmoins, le procédé MEA est sans aucun doute le plus étendu pour le captage du CO₂ dans les processus de post-combustion, même s'il nécessite une énergie de régénération élevée (Mohammadpour et al., 2019 ; Ali Saleh Bairq et al., 2019 ; Akinola et al., 2019 ; Wang et al., 2019). Des sociétés d'ingénierie, d'approvisionnement, de construction et du service comme KBR (Texas), ou des leaders de la production d'électricité comme Alstom (France), parient sur cette technologie.

Une conception, une mise à l'échelle, un contrôle et une optimisation fiables des processus du captage du CO₂ en post-combustion nécessitent l'utilisation d'une modélisation et d'une simulation précises de l'absorbeur. Dans ce contexte, divers modèles ont été développés pour la simulation de l'absorption réactive des gaz acides, l'étage d'équilibre et le modèle basé sur les taux. Le modèle d'équilibre est relativement simple où l'équilibre vapeur-liquide est supposé avoir lieu à chaque étape (étage). Pour ajuster la description théorique de l'équilibre aux conditions réelles, des efficacités de plateau ou une hauteur équivalente à une plaque théorique (HETP) sont introduites (Taylor et Krishna, 1993). Alors que, dans le modèle basé sur les taux, les phases gazeuse et liquide sont équilibrées séparément en considérant les flux de masse et de chaleur à travers l'interface (Seader, 1989). Dans ce modèle, trois types ont été distingués: le modèle du contacteur différentiel continu (CDC), le modèle de la réaction en film continu (RFC), et le modèle d'étage de non-équilibre (ENEq). Par ailleurs, plusieurs travaux de recherche ont prouvé que l'application des modèles basés sur les taux pour la modélisation du processus du captage du CO₂ par des solutions d'amine est supérieure aux modèles d'équilibre (Al-Baghliet al., 2001; Simon et al., 2011; Faramarzi et al., 2010; Zhang et al., 2009; Lawal et al., 2009; Afkhamipour and Mofarahi, 2013).

Dans le cadre de cette étude, l'absorption réactive du CO₂ avec une solution aqueuse de la monoéthanolamine dans une colonne à garnissage a été modélisée. En résumé, les quatre principaux objectifs de la présente thèse sont énumérés comme suit :

- ✓ Le développement d'un modèle mathématique qui décrit l'absorption réactive du dioxyde de carbone dans une solution aqueuse de monoéthanolamine chargée en appliquant la version révisée du modèle CDC (contacteur différentiel continu) proposé par Llano-Restrepo et Araujo-Lopez (2015) pour obtenir une formulation fiable des équations différentielles qui expriment les bilans de masse et de chaleur.

- ✓ Une bonne modélisation nécessite l'utilisation des corrélations (ou méthodes) les plus appropriées actuellement disponibles pour la prédiction de la densité, de la viscosité, de la constante d'Henry, et de la tension superficielle dans des solutions aqueuses de monoéthanolamine chargées ou déchargées en CO₂. Par conséquent, une étude bibliographique approfondie a été menée; plusieurs données expérimentales ont été collectées et comparées aux corrélations (ou méthodes) disponibles dans la littérature pour chaque paramètre et leurs intervalles de validité ont été examinées.

- ✓ Afin de résoudre les équations différentielles qui décrivent les bilans massiques et énergétiques inclus dans le modèle, un programme informatique a été codé dans le logiciel Matlab. Par la suite, Le modèle était validé en simulant des données expérimentales d'une colonne à garnissage à l'échelle pilote rapportée dans la littérature.

- ✓ Une étude paramétrique basée sur l'approche étape-par-étape a été effectuée afin d'étudier les effets des cinq paramètres différents (le modèle cinétique, le facteur d'accélération, l'enthalpie d'absorption, la pression de vapeur, et la diffusivité du CO₂ dans une solution aqueuse de MEA) sur les performances de la colonne (les profils de température et de la charge du CO₂ dans la phase liquide).

Chapitre I

I. Etat de l'art

I.1. Différentes technologies du CSC

Selon le cinquième rapport de la commission intergouvernementale sur les changements climatiques (IPCC, 2005), le CSC peut être appliqué à des grandes sources ponctuelles. Le CO_2 capté peut être comprimé et transporté pour être séquestré dans des formations géologiques, dans l'océan, dans des carbonates minéraux, ou utilisé comme une matière première pour des processus industriels. Il existe trois voies principales des systèmes du captage du CO_2 : la post-combustion, la pré-combustion et la combustion par oxy-combustible (Figueroa., et al. 2008).

Pour le captage en post-combustion, le CO_2 est séquestré des gaz de combustion après que les combustibles ont été complètement brûlés. Cette technique est la plus utilisée en raison de sa simplicité d'intégration aux unités industrielles existantes. Néanmoins, à cause de la faible concentration du CO_2 en postcombustion (4 à 14 %), la séparation est plus délicate. De plus, l'opération est relativement coûteuse et nécessite des quantités importantes d'énergie, ce qui double pratiquement la consommation de l'installation existante. En outre, ces procédés du captage nécessitent des équipements encombrants.

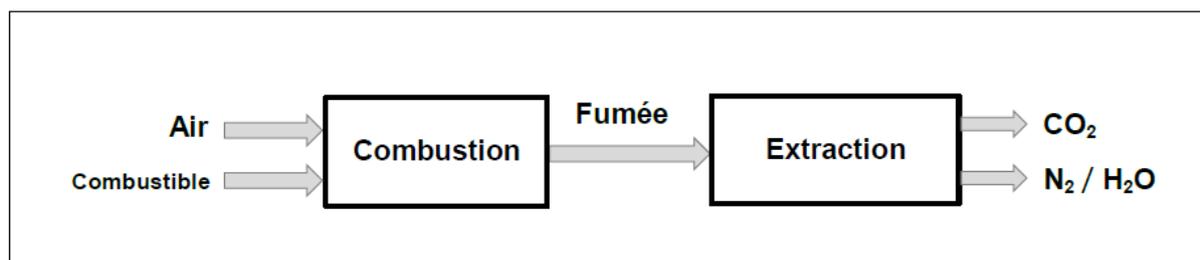


Figure 1. Schéma d'un procédé de captage du CO_2 en post-combustion

Pour le captage en pré-combustion, la séparation est réalisée en plusieurs étapes. Le combustible est d'abord converti en gaz de synthèse contenant le CO et le H_2 . Cela est réalisé soit par une oxydation partielle du charbon en présence de l'oxygène, soit par le reformage à la vapeur du gaz naturel en présence d'eau. Le mélange du CO et H_2 est ensuite envoyé vers un réacteur catalytique (shift convertisseur), où le CO réagit avec l'eau et forme un mélange du H_2 et du CO_2 qui peut être séparé par la suite sous pression. Cette technique peut être

également utilisée dans les centrales fonctionnant avec le gaz naturel. Dans ce cas, le reformage du méthane à la vapeur est appliqué afin de convertir le gaz naturel en gaz de synthèse.

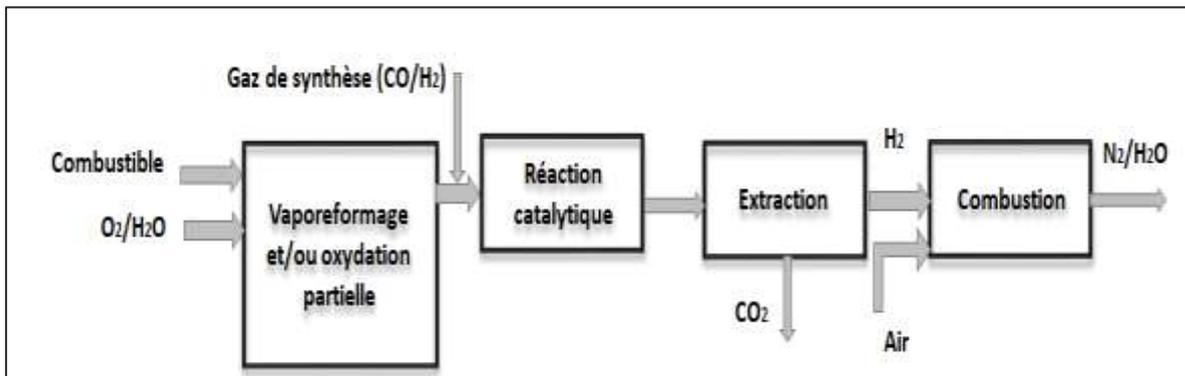


Figure 2. Schéma d'un procédé du captage du CO_2 en pré-combustion

Enfin, dans le cas de la combustion par oxy-combustible, le combustible fossile est brûlé dans de l'oxygène quasi-pur (95%) à la place de l'air pour produire des fumées riches en CO_2 et en vapeur d'eau et pauvres en azote (N_2) ; qui sont presque prêtes pour le transport et le stockage. La séparation de l'oxygène de l'air peut être effectuée par une voie cryogénique, où l'air est comprimé et refroidi à basse température (-180°C). Les chaudières doivent être adaptées pour fonctionner sous oxygène. La séparation est donc très coûteuse en termes d'énergie et en termes du coût d'exploitation.

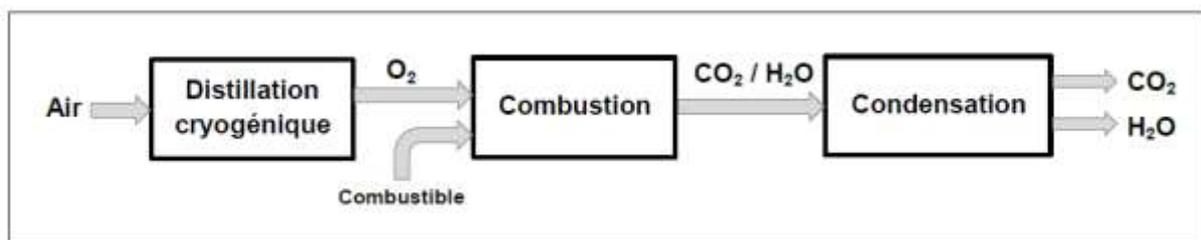


Figure 3. Schéma d'un procédé du captage du CO_2 en combustion par oxy-combustible

I.2. Types des technologies du captage du CO_2

Un certain nombre de technologies de séparation pourraient être utilisées avec le captage en postcombustion. Ceux-ci comprennent:

- L'adsorption;
- L'absorption physique;
- L'absorption chimique;
- La séparation cryogénique;

- La séparation sur membrane.

I.2.1. Adsorption

L'adsorption est un processus physique qui implique la fixation d'un gaz ou d'un liquide (adsorbat) à une surface solide (adsorbant). L'adsorbant est régénéré par l'application de chaleur (adsorption modulée en température, TSA) ou la réduction de pression (adsorption modulée en pression, PSA). Les adsorbants qui pourraient être appliqués au captage du CO₂ comprennent le charbon actif, l'alumine, les oxydes métalliques et les zéolithes (IEA GHG, 1993; Zhao et al., 2007).

Les systèmes d'adsorption actuels ne peuvent pas être appliqués dans le traitement des gaz de combustion à grande échelle. À une telle échelle, la faible capacité d'adsorption de la plupart des adsorbants disponibles peut poser des défis importants. De plus, les flux du gaz de combustion à traiter doivent avoir des concentrations du CO₂ élevées en raison de la sélectivité généralement faible de la plupart des adsorbants disponibles. Par exemple, les zéolithes ont une plus forte affinité pour la vapeur d'eau (IEA, 2004, 2007; Zhao et al., 2007).

I.2.2. Absorption physique

Cela implique l'absorption physique du CO₂ dans un solvant basé sur la loi d'Henry. La régénération peut être réalisée en utilisant la chaleur, la réduction de pression ou les deux. L'absorption a lieu à des pressions partielles élevées du CO₂. En tant que tels, les principaux besoins en énergie proviennent de la pressurisation des gaz de combustion. Par conséquent, l'absorption physique n'est pas économique pour les flux des gaz de combustion avec des pressions partielles du CO₂ inférieures à 15% en volume (Chakravati et al., 2001; IEA, 2004). Les solvants typiques sont le Selexol (diméthyl éthers de polyéthylène glycol) et le Rectisol (méthanol) IEA GHG (1993).

I.2.3. Absorption chimique

L'absorption chimique est un processus en deux étapes pour la purification des gaz. La première étape consiste en l'absorption physique d'un gaz dans un solvant; suivie d'une deuxième étape où se produit une réaction entre le gaz et le solvant. Cette réaction est le point clé où les composants peuvent être considérablement réduits pour atteindre le niveau des spécifications. La réaction chimique peut être divisée en deux groupes, la réaction irréversible et réversible.

La réaction réversible est le processus d'absorption chimique le plus courant dans le traitement des gaz, en particulier dans le processus d'élimination des gaz acides. C'est pourquoi le processus de régénération des solvants est installé après l'unité de purification des gaz acides.

I.2.4. Séparation cryogénique

La séparation cryogénique est une technologie relativement nouvelle pour capter le CO₂ qui est basée sur la suppression cryogénique du CO₂. Cette technologie repose sur l'hypothèse qu'avant le refroidissement, tous les autres gaz issus de la combustion à l'exception du N₂ et du CO₂ sont éliminés. Le gaz restant est ensuite envoyé dans une chambre cryogénique où la température et la pression sont manipulées pour liquéfier le CO₂ (à la pression atmosphérique, le CO₂ se condense à -56,6°C).

Le CO₂ se condense et le N₂ reste sous l'état gazeux et s'échappe par une sortie au sommet de la chambre. Grands avantages de cette technique est que le procédé nécessite aucun absorbant chimique et il peut être exploité à la pression atmosphérique. Les principaux inconvénients sont les étapes coûteuses pour éliminer la teneur en eau du courant d'alimentation avant l'unité de refroidissement ainsi que la chute de l'efficacité en raison de la formation progressive d'une couche de CO₂ solide sur les surfaces d'échangeur de chaleur.

I.2.5. Séparation sur membrane

Lorsque les membranes sont utilisées pour l'absorption des gaz, les membranes agissent comme des dispositifs de contact entre le flux gazeux et le solvant liquide. La membrane peut ou non fournir une sélectivité supplémentaire. Ceux-ci offrent certains avantages par rapport aux dispositifs de mise en contact conventionnels telles que les colonnes garnies. Ils nécessitent toutefois que les pressions côté liquide et côté gaz soient égales pour permettre le transport du CO₂ à travers la membrane. Leur efficacité de séparation dépend de la pression partielle du CO₂.

I.3. Solvants chimiques

Le solvant chimique idéal possède (Davidson, 2007):

- Réactivité élevée par rapport au CO₂, ce qui réduirait les exigences sur la hauteur de l'absorbeur et/ou sur les débits de circulation du solvant.
- Faible coût de régénération, basé sur une faible enthalpie de réaction avec le CO₂.

- Capacité d'absorption élevée, qui influence directement les exigences sur le débit de circulation du solvant.
- Stabilité thermique élevée et dégradation réduite des solvants.
- Faible impact environnemental.
- Faible coût des solvants, devrait être facile et pas cher à produire.

I.3.1. Solvants à base d'amine

Les amines sont utilisées depuis environ 75 ans pour traiter les flux des gaz industriels. Elles peuvent être classées comme primaires, secondaires ou tertiaires en fonction du degré de substitution de l'atome d'azote. La monoéthanolamine (MEA) se compose d'une chaîne alcool et de deux atomes d'hydrogène liés à un atome d'azote, elle est donc classé comme amine primaire de formule moléculaire $(C_2H_4OH)NH_2$. La diéthanolamine (DEA) se compose de deux chaînes d'alcool et d'un atome d'hydrogène liés à un atome d'azote, elle est donc une amine secondaire de formule moléculaire $(C_2H_4OH)_2NH$. De la même manière, la triéthanolamine (TEA) est une amine tertiaire de formule moléculaire $(C_2H_4OH)_3N$ (Booth, 2005).

Une variété des dérivés d'éthanolamine peut être produite en remplaçant un ou plusieurs des groupes éthanol par d'autres groupes hydrocarbonés. Un exemple de ceci est l'amine tertiaire méthyldiéthanolamine (MDEA) où un groupe méthyle remplace l'un des groupes éthanol. La MDEA a la formule moléculaire $(C_2H_4OH)_2N(CH_3)$ (Booth, 2005).

Les alcanolamines primaires et secondaires réagissent rapidement avec le CO_2 pour former des carbamates. Les alcanolamines tertiaires ne possèdent pas un atome d'hydrogène attaché à l'atome d'azote. Elles facilitent donc la réaction d'hydrolyse du CO_2 pour former des bicarbonates. L'enthalpie de réaction impliquée dans la formation du bicarbonate est inférieure à celle de la formation du carbamate ; par conséquent, les amines tertiaires comme la MDEA sont souvent mélangées avec des amines primaires ou secondaires pour réduire les coûts de régénération des solvants (Vaidya et Kenig, 2007). Les amines à encombrement stérique sont des amines primaires et secondaires modifiées pour réduire les coûts de régénération comme la 2-amino-2-méthyl-1-propanol (AMP) et la 2-pipéridineéthanol (Vaidya et Kenig, 2007).

I.4. Modélisation mathématique de l'absorption chimique du CO₂ dans une colonne à garnissage

Pour la section d'une colonne garnie, deux approches sont appliquées, l'étage en équilibre (equilibrium stage) et le modèle basé sur les taux (rate-based-model), dans la modélisation du transfert de matière (liquide-vapeur) afin de décrire le processus d'absorption (Taylor et Krishna, 1993). D'une part, l'approche de l'étage d'équilibre (la traditionnelle) suppose que les deux phases, liquide et vapeur, soient en équilibre thermodynamique l'une avec l'autre tout en quittant n'importe quel étage comme indiqué par Henley et Seader (1981). D'autre part, le modèle basé sur les taux prend en considération les flux de matière et de chaleur à travers l'interface; en conséquence, les deux phases, liquide et gazeuse, sont équilibrées séparément comme démontré par Seader (1989).

Il existe trois types du modèle basé sur les taux: le modèle du contacteur différentiel continu (CDC), le modèle de la réaction en film continu (RFC), et le modèle d'étage de non-équilibre (ENEq). Le modèle du contacteur différentiel continu, composé d'un ensemble d'équations différentielles ordinaires, a été suggéré et formulé par Pandya (1983) en utilisant l'approche du changement différentiel rapportée par Treybal (1969). Même si, le modèle proposé par Pandya a été largement utilisé pour la modélisation et la simulation des colonnes garnies pour l'absorption du CO₂ dans les centrales électriques à combustible fossile; cependant, il a été constaté qu'il présente certaines simplifications ou hypothèses incohérentes; par conséquent, une version révisée du modèle a été suggérée par Llano-Restrepo et Araujo-Lopez (2015) sur la base de l'approche des différences finies afin de formuler les bilans massique et énergétique. En outre, Krishnamurthy et Taylor (1985a) ont proposé le modèle d'étage de non équilibre pour les séparations non réactives qui consiste en un ensemble d'équations algébriques non linéaires pour représenter les bilans de matière et de chaleur; cette approche a été utilisée pour la modélisation de l'absorption non réactive (physique) dans des colonnes à garnissage comme indiqué par (Krishnamurthy et Taylor, 1985b, 1986; Sivasubramanian et al., 1987); ensuite, il a été étendu pour représenter les séparations réactives décrites par (Kenig et al., 1997; Higler et al., 1999; Kloker, et al., 2005). Enfin, le modèle de la réaction en film continu a été initialement développé par Kenig et Gorak (1995); l'application de ce modèle pour décrire l'absorption réactive dans des colonnes garnies a été rapportée par plusieurs auteurs (Kenig et al., 2003; Noeres et al., 2003; Kucka et al., 2003a; Asprion, 2006; Kenig et Seferlis, 2009; Kale et al., 2013).

Chapitre II

II. Formulation du modèle de l'absorption réactive

Le problème de conception du transfert simultané de masse et de chaleur dans les absorbeurs à lit garni est assez complexe. Dans le cas d'un solvant chimiquement réactif, la complexité est aggravée en raison du transfert de masse avec réaction chimique. Afin de développer un modèle mathématique complet pour l'absorption du CO₂ dans des solutions aqueuses de MEA, il est essentiel de comprendre le mécanisme sous-jacent du processus d'absorption couplé aux réactions chimiques.

II.1. Bilans massiques et énergétiques

La version révisée du modèle de contacteur différentiel continu (CDC) d'une colonne à flux à contre-courant à garnissage proposé par Llano-Restrepo et Araujo-Lopez (2015) a été appliquée dans cette étude. Ce modèle est une révision du modèle original formulé par Pandya (1983) en se basant sur certaines contributions rapportées par Treybal (1969) afin d'identifier, clarifier et corriger les incohérences trouvées dans la dérivation originale du modèle de Pandya. Le modèle utilise l'approche des différences finies pour formuler tous les bilans, en les écrivant pour une section infinitésimale du contacteur continu, comme le montre la **figure 4**. De cette manière, les bilans sont exprimés en termes de changements infinitésimaux, et après avoir pris leur limite lorsque la hauteur de la section infinitésimale va à zéro, ils donnent les équations différentielles ordinaires correspondantes du modèle.

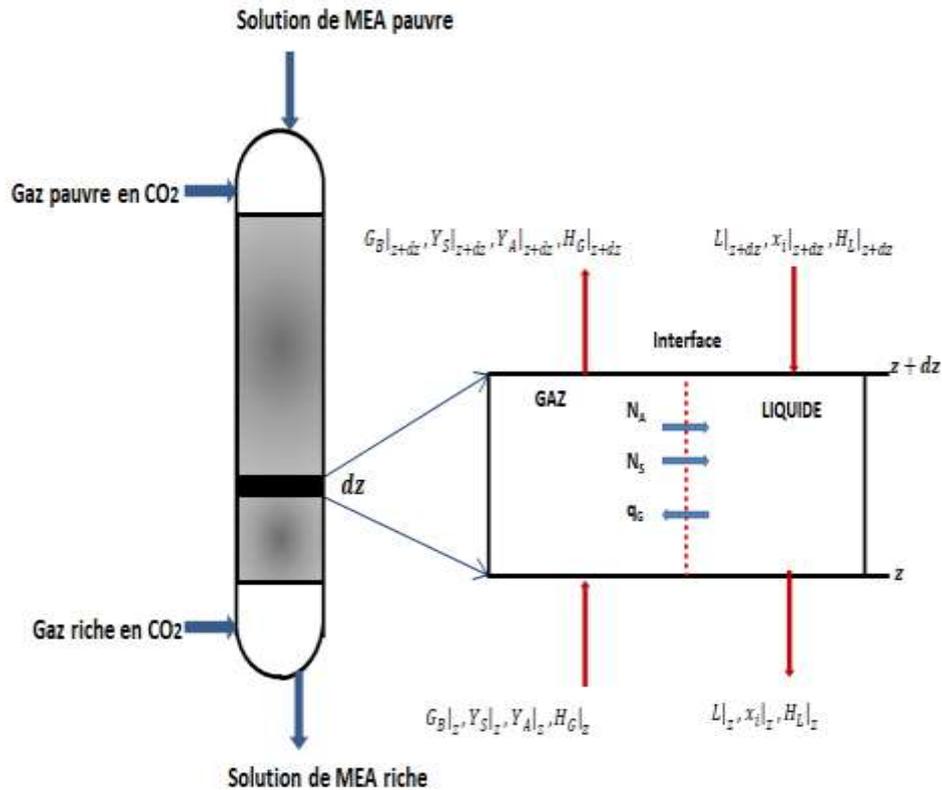


Figure 4. Élément infinitésimal d'une colonne absorbante garnie

Le processus sera analysé en termes de la théorie de deux films. Les hypothèses suivantes sont posées:

1. La réaction entre le CO_2 et le MEA est suffisamment rapide pour que le CO_2 soit complètement consommé dans le film liquide à côté de l'interface gaz-liquide et qu'il y ait un excès de MEA par rapport au CO_2 dans la solution aqueuse. En conséquence, la réaction peut être expliquée au moyen d'un facteur d'accélération du transfert de masse et la majeure partie de la phase liquide atteint l'équilibre thermodynamique.
2. L'absorbeur est considéré comme fonctionnant en régime permanent; ce qui signifie que les propriétés du gaz et du liquide sont indépendantes du temps à chaque section de la colonne.
3. Les pertes à travers la paroi de la colonne absorbante sont négligées; ainsi, la colonne fonctionne de manière adiabatique.
4. Les variations de propriétés se produisent uniquement le long de la hauteur de l'absorbeur, ce qui signifie que les changements de direction radiale sont négligeables (un régime d'écoulement piston est considéré pour les phases gazeuse et liquide).

5. L'évaporation du MEA ne se produit pas dans l'absorbeur.
6. La résistance au transfert de masse pour l'eau est négligée en phase liquide.
7. Pour le transfert de chaleur et de masse, la dispersion axiale est négligée.
8. La résistance au transfert de chaleur de la phase liquide est négligeable par rapport à la résistance de la phase gazeuse. Ainsi, l'interface gaz-liquide et la phase liquide en vrac ont toutes deux la même température.
9. Les phases liquide et gazeuse sont considérées comme des solutions idéales pour le calcul des enthalpies.
10. La surface interfaciale du transfert de masse et la zone interfaciale de transfert de chaleur sont identiques.
11. La perte de charge pour le débit du gaz peut être négligée le long de la hauteur de la colonne d'absorption.

Considérons l'élément infinitésimal d'une colonne remplie représenté sur la **figure 4**. Soit z la distance verticale du bas de la colonne (où les gaz de combustion pénètrent dans l'absorbeur) vers le haut. Soit les indices A, B et S représentent respectivement le dioxyde de carbone (gaz soluté), le gaz porteur (non absorbé) et l'eau (solvant volatil). D'après les hypothèses (2) et (4), l'élément est à l'état stationnaire et les propriétés changent uniquement le long de la coordonnée axiale z . D'après l'hypothèse (5), seul le dioxyde de carbone A , le gaz vecteur B et l'eau S sont présents dans la phase gazeuse.

II.1.1. Bilans massiques dans la phase gazeuse

a. Dioxyde de carbone

Dans l'hypothèse (7), la dispersion axiale de la masse est négligée; Par conséquent, un équilibre molaire en régime permanent sur le dioxyde de carbone dans le gaz est donnée par :

$$G_B Y_A|_z = G_B Y_A|_{z+dz} + N_A a dz \quad (II.1)$$

Tel que :

$$G_B Y_A|_{z+dz} = G_B Y_A|_z + \frac{d}{dz} (G_B Y_A) dz \quad (II.2)$$

Substitution de l'Eq (II.2) dans l'Eq (II.1) conduit à :

$$G_B Y_A|_z = G_B Y_A|_z + \frac{d}{dz} (G_B Y_A) dz + N_A a dz \quad (II.3)$$

$$\frac{d}{dz}(G_B Y_A) dz + N_A a dz = 0 \quad (II.4)$$

Divisant les deux côtés de l'Eq (II.4) sur dz , on obtient :

$$\frac{d}{dz}(G_B Y_A) = -N_A a \quad (II.5)$$

Puisque le G_B est constant, alors :

$$\frac{dY_A}{dz} = \frac{-N_A a}{G_B} \quad (II.6)$$

Soit G_B le débit molaire constant du gaz porteur par unité de surface de section transversale de l'absorbeur, Y_A et Y_S les rapports molaires en phase gazeuse de A et S par rapport à B (c'est-à-dire les moles de CO₂ et H₂O par mole de gaz porteur, respectivement), N_A et N_S les flux molaires du transfert de matière interphase du CO₂ et de H₂O, de la phase gazeuse vers la phase liquide, a la surface interfaciale du transfert de matière par unité de volume du garnissage, et z la hauteur de l'élément.

Avec :

$$N_A = k_{G,A} P (y_A - y_{A,i}) \quad (II.7)$$

Où $k_{G,A}$ est le coefficient du transfert de matière en phase gazeuse pour le CO₂, P est la pression totale en phase gazeuse, y_A est la fraction molaire du CO₂ dans la phase gazeuse en vrac, et $y_{A,i}$ est la fraction molaire du CO₂ côté de l'interface de la phase gazeuse.

La fraction molaire y_A est liée aux rapports molaire Y_A et Y_S au moyen de l'expression suivante ;

$$y_A = \frac{Y_A}{1 + Y_A + Y_S} \quad (II.8)$$

b. Vapeur d'eau

Un équilibre molaire en régime permanent sur la vapeur d'eau dans le gaz est donné par :

$$G_B Y_S|_z = G_B Y_S|_{z+dz} + N_S a dz \quad (II.9)$$

Tel que :

$$G_B Y_S|_{z+dz} = G_B Y_S|_z + \frac{d}{dz} (G_B Y_S) dz \quad (II.10)$$

Substitution de l'Eq (II.10) dans l'Eq (II.9) conduit à :

$$G_B Y_S|_z = G_B Y_S|_z + \frac{d}{dz} (G_B Y_S) dz + N_S a dz \quad (II.11)$$

$$\frac{d}{dz} (G_B Y_S) dz + N_S a dz = 0 \quad (II.12)$$

Divisant les deux côtés de l'Eq (II.12) sur dz , on obtient :

$$\frac{d}{dz} (G_B Y_S) = -N_S a \quad (II.13)$$

Puisque le G_B est constant, alors :

$$\frac{dY_S}{dz} = \frac{-N_S a}{G_B} \quad (II.14)$$

Où $k_{G,S}$ est le coefficient du transfert de matière en phase gazeuse pour le H₂O, y_S est la fraction molaire de H₂O dans la phase gazeuse en vrac, et $y_{S,i}$ est la fraction molaire de H₂O côté de l'interface de la phase gazeuse.

La fraction molaire y_S est liée aux rapports molaires Y_A et Y_S au moyen de l'expression suivante:

$$y_S = \frac{Y_S}{1 + Y_A + Y_S} \quad (II.15)$$

Les deux équations. (II.6) et (II.14) sont des équations différentielles ordinaires qui décrivent les changements (le long de la hauteur de l'absorbeur) des rapports molaires en phase gazeuse pour le CO₂ et la vapeur d'eau par rapport au gaz vecteur, respectivement.

II.1.2. Bilan de matière total

Un équilibre molaire total en régime permanent est donné par

$$L|_{z+dz} + G|_z = L|_z + G|_{z+dz} \quad (II.16)$$

Avec :

$$L|_{z+dz} = L|_z + \frac{d}{dz}(L)dz \quad (II.17)$$

$$G|_{z+dz} = G|_z + \frac{d}{dz}(G)dz \quad (II.18)$$

Substitution des Eqs (II.17) et (II.18) dans l'Eq (II.16) conduit à :

$$L|_z + \frac{d}{dz}(L)dz + G|_z = L|_z + G|_z + \frac{d}{dz}(G)dz \quad (II.19)$$

$$\frac{dL}{dz} = \frac{dG}{dz} \quad (II.20)$$

Soit L et G les débits molaires totaux du liquide et du gaz, respectivement, par unité de surface de la section transversale de l'absorbeur.

Le débit molaire total du gaz est lié au débit molaire du gaz vecteur B par la relation suivante:

$$G = G_B(1 + Y_A + Y_S) \quad (II.21)$$

Prenant la dérivée par rapport à z des deux côtés de l'Eq (II.21) et assimiler l'expression résultante au côté droit de l'Eq (II.20) conduit à :

$$\frac{dL}{dz} = G_B \left(\frac{dY_A}{dz} + \frac{dY_S}{dz} \right) \quad (II.22)$$

L'équation (II.22) est une équation différentielle ordinaire qui décrit le changement (le long de la hauteur de l'absorbeur) du débit molaire total du liquide.

II.1.3. Bilans massiques dans la phase liquide

La réaction globale qui se produit dans le film liquide peut s'écrire comme suit:



Où $A_{(g)}$ est le CO_2 (gaz soluté), $\nu = 2$, R est la MEA, et P et Q sont les produits globaux (l'ion carbamate et la MEA protoné). Soit x_A , x_S , x_P et x_Q les fractions molaires de A , S , P et Q dans la phase liquide en vrac.

a. Dioxyde de carbone libre

Un équilibre molaire en régime permanent sur le CO₂ libre en phase liquide conduit à :

$$Lx_A|_z = Lx_A|_{z+dz} + N_A a dz - r_A a dz \quad (II.24)$$

$$Lx_A|_{z+dz} = Lx_A|_z + \frac{d}{dz}(Lx_A)dz \quad (II.25)$$

Substitution de l'Eq (II.25) dans l'Eq (II.24) conduit à :

$$Lx_A|_z = Lx_A|_z + \frac{d}{dz}(Lx_A)dz + N_A a dz - r_A a dz \quad (II.26)$$

$$\frac{d}{dz}(Lx_A)dz + N_A a dz - r_A a dz = 0 \quad (II.27)$$

Divisant les deux côtés de l'Eq (II.27) sur dz , on obtient :

$$\frac{d}{dz}(Lx_A) + N_A a - r_A a = 0 \quad (II.28)$$

À partir de l'hypothèse (1), le CO₂ est complètement consommé dans le film liquide côté de l'interface gaz-liquide car la réaction entre le CO₂ et la MEA est très rapide et il y a un excès de MEA par rapport au CO₂ dans la solution aqueuse. Par conséquent, r_A est exactement égal au flux du transfert de matière interfacial N_A et les deux quantités s'annulent de l'Eq (II.28).

$$L \frac{dx_A}{dz} = -x_A \frac{dL}{dz} \quad (II.29)$$

b. Vapeur d'eau

Un équilibre molaire en régime permanent sur le H₂O en phase liquide conduit à :

$$Lx_S|_z = Lx_S|_{z+dz} + N_S a dz \quad (II.30)$$

$$Lx_S|_{z+dz} = Lx_S|_z + \frac{d}{dz}(Lx_S)dz \quad (II.31)$$

Substitution de l'Eq (II.31) dans l'Eq (II.30) conduit à :

$$Lx_S|_z = Lx_S|_z + \frac{d}{dz}(Lx_S)dz + N_S a dz \quad (II.32)$$

$$\frac{d}{dz}(Lx_S)dz + N_S a dz = 0 \quad (II.33)$$

Divisant les deux côtés de l'Eq (II.33) sur dz , on obtient :

$$\frac{d}{dz}(Lx_S) + N_S a = 0 \quad (II.34)$$

$$L \frac{dx_S}{dz} = -N_S a - x_S \frac{dL}{dz} \quad (II.35)$$

c. Free MEA

Si r_R est la vitesse molaire de disparition de R (c'est-à-dire la MEA libre) par réaction et par unité de surface interfaciale, alors en considérant la stoechiométrie de l'Eq (II.23) et l'hypothèse (1), il s'ensuit que $r_R = \mathcal{V} r_A = \mathcal{V} N_A$. En conséquence, un équilibre molaire à l'état d'équilibre sur la MEA libre dans la phase liquide conduit à :

$$Lx_R|_z = Lx_R|_{z+dz} - \mathcal{V}N_A a dz \quad (II.36)$$

$$Lx_R|_{z+dz} = Lx_R|_z + \frac{d}{dz}(Lx_R)dz \quad (II.37)$$

Substitution de l'Eq (II.37) dans l'Eq (II.36) conduit à :

$$Lx_R|_z = Lx_R|_z + \frac{d}{dz}(Lx_R)dz - \mathcal{V}N_A a dz \quad (II.38)$$

$$\frac{d}{dz}(Lx_R)dz - \mathcal{V}N_A a dz = 0 \quad (II.39)$$

Divisant les deux côtés de l'Eq (II.39) sur dz , on obtient :

$$\frac{d}{dz}(Lx_R) - \mathcal{V}N_A a = 0 \quad (II.40)$$

$$L \frac{dx_R}{dz} = \mathcal{V}N_A a - x_R \frac{dL}{dz} \quad (II.41)$$

d. Produit P

Si r_P est la vitesse molaire de production de P (c'est-à-dire l'ion carbamate) par réaction et par unité de surface interfaciale, alors en considérant la stoechiométrie de l'Eq (II. 23) et l'hypothèse (1), il s'ensuit que $r_P = r_A = N_A$. En conséquence, un équilibre molaire en régime permanent sur le produit P en phase liquide conduit à :

$$Lx_P|_z = Lx_P|_{z+dz} + N_A a dz \quad (II.42)$$

$$L \frac{dx_P}{dz} = -N_A a - x_P \frac{dL}{dz} \quad (II.43)$$

II.1.4. Bilan énergétique dans la phase gazeuse

Soit T_G et H_G la température et l'enthalpie molaire totale (par mole du gaz porteur B) de la phase gazeuse, et soit $H_A^{(g)}$ et $H_S^{(g)}$ les enthalpies molaires de la phase gazeuse (g) du CO_2 et de H_2O , respectivement.

Si les hypothèses (3), (7) et (10) pour un fonctionnement adiabatique, pour une dispersion axiale négligeable de la chaleur et pour l'égalité des aires interfaciales du transfert de chaleur et de masse, respectivement, sont prises en considération, et q_G^* représente le flux du transfert de chaleur convectif interphase (corrigé par transfert de masse) du gaz à la phase liquide, puis le bilan énergétique en régime permanent dans la phase gazeuse est donné par:

$$G_B H_G|_z = G_B H_G|_{z+dz} + (N_A a dz) H_A^{(g)}(T_G) + (N_S a dz) H_S^{(g)}(T_G) + q_G^* a dz \quad (\text{II.44})$$

$$G_B H_G|_{z+dz} = G_B H_G|_z + \frac{d}{dz} (G_B H_G) dz \quad (\text{II.45})$$

Substitution de l'Eq (II.45) dans l'Eq (II.44) conduit à :

$$G_B H_G|_z = G_B H_G|_z + \frac{d}{dz} (G_B H_G) dz + (N_A a dz) H_A^{(g)}(T_G) + (N_S a dz) H_S^{(g)}(T_G) + q_G^* a dz \quad (\text{II.46})$$

$$\frac{d}{dz} (G_B H_G) dz + (N_A a dz) H_A^{(g)}(T_G) + (N_S a dz) H_S^{(g)}(T_G) + q_G^* a dz = 0 \quad (\text{II.47})$$

Divisant les deux côtés de l'Eq (II.47) sur dz , on obtient :

$$G_B \frac{dH_G}{dz} = -(N_A a) H_A^{(g)}(T_G) - (N_S a) H_S^{(g)}(T_G) - q_G^* a \quad (\text{II.48})$$

A partir des Eqs (II.6) et (II.14), on a :

$$N_A a = -G_B \frac{dY_A}{dz} \quad (\text{II.49})$$

$$N_S a = -G_B \frac{dY_S}{dz} \quad (\text{II.50})$$

Substitution des Eqs (II.49) et (II.50) dans l'Eq (II.48) conduit à :

$$G_B \frac{dH_G}{dz} = \left(G_B \frac{dY_A}{dz} \right) H_A^{(g)}(T_G) + \left(G_B \frac{dY_S}{dz} \right) H_S^{(g)}(T_G) - q_G^* a \quad (\text{II.51})$$

Divisant les deux côtés de l'Eq (II.51) sur G_B , on obtient :

$$\frac{dH_G}{dz} = H_A^{(g)}(T_G) \frac{dY_A}{dz} + H_S^{(g)}(T_G) \frac{dY_S}{dz} - \frac{q_G^* a}{G_B} \quad (II.52)$$

A partir de l'hypothèse (9), la phase gazeuse est considérée comme une solution idéale pour le calcul de son enthalpie; par conséquent, l'enthalpie molaire totale (par mole du gaz porteur B) de la phase gazeuse est donnée par la règle d'additivité, comme suit:

$$H_G = H_B^{(g)}(T_G) + Y_A H_A^{(g)}(T_G) + Y_S H_S^{(g)}(T_G) \quad (II.53)$$

En prenant la dérivée par rapport à z des deux côtés de l'équation (II.53), on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{dH_G}{dz} = \frac{dH_B^{(g)}}{dz} + Y_A \frac{dH_A^{(g)}}{dz} + H_A^{(g)}(T_G) \frac{dY_A}{dz} + Y_S \frac{dH_S^{(g)}}{dz} \\ + H_S^{(g)}(T_G) \frac{dY_S}{dz} \end{aligned} \quad (II.54)$$

En mettant sur le même plan les côtés droits des Eqs (II.52) et (II.54), il s'ensuit que :

$$\frac{dH_B^{(g)}}{dz} + Y_A \frac{dH_A^{(g)}}{dz} + Y_S \frac{dH_S^{(g)}}{dz} = - \frac{q_G^* a}{G_B} \quad (II.55)$$

D'après la définition de la capacité calorifique molaire isobare, on a :

$$H_A^{(g)}(T_G) = H_A^{(g)}(T_0) + \int_{T_0}^{T_G} C_{p,A}^{(g)} dT \quad (II.56)$$

En prenant la dérivée par rapport à z des deux côtés de l'équation (II.56), on obtient :

$$\frac{dH_A^{(g)}}{dz} = C_{p,A}^{(g)} \frac{dT_G}{dz} \quad (II.57)$$

De la même façon, on a:

$$\frac{dH_S^{(g)}}{dz} = C_{p,S}^{(g)} \frac{dT_G}{dz} \quad (II.58)$$

$$\frac{dH_B^{(g)}}{dz} = C_{p,B}^{(g)} \frac{dT_G}{dz} \quad (II.59)$$

Substitution des Eqs (II.57)-(II.59) par l'Eq (II.55), suivi d'un réarrangement de l'expression résultante, conduit à l'équation suivante:

$$\frac{dT_G}{dz} = \frac{-q_G^* a}{G_B (C_{p,B}^{(g)} + Y_A C_{p,A}^{(g)} + Y_S C_{p,S}^{(g)})} \quad (II.60)$$

Avec :

$$q_G^* = h_G^* (T_G - T_L) \quad (II.61)$$

Où h_G^* est le coefficient du transfert de chaleur convectif en phase gazeuse (corrigé par le transfert de matière) et T_L est la température en phase liquide. L'hypothèse (6), selon laquelle la résistance en phase liquide au transfert de chaleur est négligeable, a été prise en considération pour écrire l'équation (II.61).

L'équation (II.60) est une équation différentielle ordinaire qui décrit le changement (le long de la hauteur de l'absorbeur) de la température de la phase gazeuse.

II.1.5. Bilan énergétique dans la phase liquide

Soit T_L et H_L la température et l'enthalpie molaire totale de la phase liquide. Si les hypothèses (3), (4) et (8) pour des valeurs de dispersion axiales de chaleur négligeables, pour un fonctionnement adiabatique, et pour l'égalité des surfaces interfaciales du transfert de chaleur et de masse, respectivement, sont prises en considération, l'équilibre énergétique en régime permanent dans le liquide phase (voir Fig.1) est donnée par

$$LH_L|_z = LH_L|_{z+dz} + (N_A a dz)H_A^{(g)}(T_G) + (N_S a dz)H_S^{(g)}(T_G) + q_G^* a dz \quad (II.62)$$

$$LH_L|_{z+dz} = LH_L|_z + \frac{d}{dz}(LH_L)dz \quad (II.63)$$

$$LH_L|_z = LH_L|_z + \frac{d}{dz}(LH_L)dz + (N_A a dz)H_A^{(g)}(T_G) + (N_S a dz)H_S^{(g)}(T_G) + q_G^* a dz \quad (II.64)$$

$$\frac{d}{dz}(LH_L)dz + (N_A a dz)H_A^{(g)}(T_G) + (N_S a dz)H_S^{(g)}(T_G) + q_G^* a dz = 0 \quad (II.65)$$

Divisant les deux côtés de l'Eq (II.65) sur dz , on obtient :

$$L \frac{dH_L}{dz} + H_L(T_L) \frac{dL}{dz} = -(N_A a)H_A^{(g)}(T_G) - (N_S a)H_S^{(g)}(T_G) - q_G^* a \quad (II.66)$$

D'après la définition de la capacité calorifique molaire isobare, on a :

$$H_L(T_L) = H_L(T_0) + \int_{T_0}^{T_L} C_{p,L} dT \quad (II.67)$$

À partir de l'hypothèse (9) que la phase liquide se comporte comme une solution idéale, son enthalpie molaire totale $H_L(T_0)$ est donnée par la règle d'additivité, comme suit:

$$H_L(T_0) = x_A H_A^{(l)}(T_0) + x_S H_S^{(l)}(T_0) + x_R H_R^{(l)}(T_0) + x_P H_P^{(l)}(T_0) + x_Q H_Q^{(l)}(T_0) \quad (II.68)$$

Prenant la dérivée par rapport à z des deux côtés des Eqs (II.67) et (II.68) et en remplaçant l'expression résultant de l'Eq (68) dans l'expression résultant de l'Eq (II.67), et on obtient :

$$\frac{dH_L}{dz} = H_A^{(l)}(T_0) \frac{dx_A}{dz} + H_S^{(l)}(T_0) \frac{dx_S}{dz} + H_R^{(l)}(T_0) \frac{dx_R}{dz} + H_P^{(l)}(T_0) \frac{dx_P}{dz} + H_Q^{(l)}(T_0) \frac{dx_Q}{dz} + C_{p,L} \frac{dT_L}{dz} \quad (II.69)$$

Substitution de l'Eq (II.69) dans l'Eq (II.66) conduit à :

$$\begin{aligned} LH_A^{(l)}(T_0) \frac{dx_A}{dz} + LH_S^{(l)}(T_0) \frac{dx_S}{dz} + LH_R^{(l)}(T_0) \frac{dx_R}{dz} + LH_P^{(l)}(T_0) \frac{dx_P}{dz} + LH_Q^{(l)}(T_0) \frac{dx_Q}{dz} \\ + LC_{p,L} \frac{dT_L}{dz} + H_L(T_L) \frac{dL}{dz} \\ = -(N_A a) H_A^{(g)}(T_G) - (N_S a) H_S^{(g)}(T_G) - q_G^* a \end{aligned} \quad (II.70)$$

Substitution des Eqs (II.29), (II.35), (II.41) et (II.43) (pour P et Q) dans l'Eq (II.70), suivie d'un réarrangement de l'équation résultante, et une autre substitution de l'Eq (II.68), conduisent à l'expression suivante:

$$\begin{aligned} LC_{p,L} \frac{dT_L}{dz} + [H_L(T_L) - H_L(T_0)] \frac{dL}{dz} - (N_A a) [H_P^{(l)}(T_0) + H_Q^{(l)}(T_0) - H_A^{(g)}(T_G) - LH_R^{(l)}(T_0)] \\ = -(N_S a) [H_S^{(g)}(T_G) - H_S^{(l)}(T_0)] - q_G^* a \end{aligned} \quad (II.71)$$

De la même façon que l'Eq (II.56), on écrit :

$$H_S^{(g)}(T_G) = H_S^{(g)}(T_0) + \int_{T_0}^{T_G} C_{p,S}^{(g)} dT \quad (II.72)$$

Substitution des Eqs (II.59) et (II.72) dans l'Eq (II.71) conduit à :

$$\begin{aligned}
LC_{p,L} \frac{dT_L}{dz} + [H_L(T_L) - H_L(T_0)] \frac{dL}{dz} \\
- (N_A a) \left\{ [H_P^{(l)}(T_0) + H_Q^{(l)}(T_0) - H_A^{(g)}(T_0) - \mathcal{V}H_R^{(l)}(T_0)] - \int_{T_0}^{T_G} C_{p,S}^{(g)} dT \right\} \\
= -(N_S a) \left\{ [H_S^{(g)}(T_0) - H_S^{(l)}(T_0)] + \int_{T_0}^{T_G} C_{p,S}^{(g)} dT \right\} - q_G^* a \quad (II.73)
\end{aligned}$$

De la définition de l'enthalpie molaire de réaction (ou changement d'enthalpie molaire par réaction), l'expression:

$$\Delta H_{rx}^{(abs)}(T_0) = H_P^{(l)}(T_0) + H_Q^{(l)}(T_0) - H_A^{(g)}(T_0) - \mathcal{V}H_R^{(l)}(T_0) \quad (II.74)$$

$\Delta H_{rx}^{(abs)}(T_0)$ correspond à la variation d'enthalpie molaire de la réaction donnée par l'Eq (II.23) à la température de référence T_0 .

D'après la définition de l'enthalpie molaire de vaporisation,

$$\Delta H_{vap,S}(T_0) = H_S^{(g)}(T_0) - H_S^{(l)}(T_0) \quad (II.75)$$

$\Delta H_{vap,S}(T_0)$ est l'enthalpie molaire de la vaporisation de l'eau à la température de référence T_0 .

Substitution des Eqs (II.74) et (II.75) dans l'Eq (II.73) et l'utilisation de l'Eq (II.67) donne :

$$\begin{aligned}
LC_{p,L} \frac{dT_L}{dz} + \frac{dL}{dz} \int_{T_0}^{T_L} C_{p,L} dT \\
= (N_A a) \left[\Delta H_{rx}^{(abs)}(T_0) - \int_{T_0}^{T_G} C_{p,A}^{(g)} dT \right] \\
- (N_S a) \left[\Delta H_{vap,S}(T_0) + \int_{T_0}^{T_G} C_{p,S}^{(g)} dT \right] - q_G^* a \quad (II.74)
\end{aligned}$$

Substitution des Eqs (II.49), (II.50) et (II.22) dans l'Eq (II.74) suivi d'un réarrangement de l'équation résultante conduit à l'expression suivante:

$$\begin{aligned}
LC_{p,L} \frac{dT_L}{dz} = & -q_G^* a + G_B \left[\int_{T_0}^{T_G} C_{p,A}^{(g)} dT - \Delta H_{rx}^{(abs)}(T_0) - \int_{T_0}^{T_L} C_{p,L} dT \right] \frac{dY_A}{dz} \\
& + G_B \left[\int_{T_0}^{T_G} C_{p,S}^{(g)} dT - \Delta H_{vap,S}(T_0) \right. \\
& \left. - \int_{T_0}^{T_L} C_{p,L} dT \right] \frac{dY_S}{dz}
\end{aligned} \tag{II.75}$$

A partir de l'Eq (II.60), on obtient :

$$q_G^* a = -G_B \left(C_{p,B}^{(g)} + Y_A C_{p,A}^{(g)} + Y_S C_{p,S}^{(g)} \right) \frac{dT_G}{dz} \tag{II.76}$$

Substitution de l'Eq (II.76) dans l'Eq (II.75), suivi de quelques réarrangements de l'équation résultante, conduit à l'expression finale :

$$\begin{aligned}
\frac{dT_L}{dz} = & \frac{G_B}{LC_{p,L}} \left\{ \left(C_{p,B}^{(g)} + Y_A C_{p,A}^{(g)} + Y_S C_{p,S}^{(g)} \right) \frac{dT_G}{dz} \right. \\
& + \left[\int_{T_0}^{T_G} C_{p,A}^{(g)} dT - \Delta H_{rx}^{(abs)}(T_0) - \int_{T_0}^{T_L} C_{p,L} dT \right] \frac{dY_A}{dz} \\
& \left. + \left[\int_{T_0}^{T_G} C_{p,S}^{(g)} dT - \Delta H_{vap,S}(T_0) - \int_{T_0}^{T_L} C_{p,L} dT \right] \frac{dY_S}{dz} \right\}
\end{aligned} \tag{II.77}$$

Ainsi, la dérivation révisée du modèle de Pandya conduit à cinq équations différentielles ordinaires: Eqs (II.6), (II.14), (II.22), (II.60) et (II.77).

II.2. Chimie du système CO₂-MEA

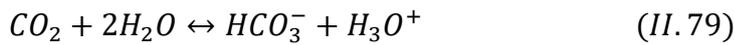
II.2.1. Modèle de spéciation à l'équilibre

Le modèle de spéciation à l'équilibre développé par [Matin et al. \(2012\)](#) a été utilisé dans cette étude afin de déterminer les concentrations des espèces chimiques en vrac nécessaires pour tous les calculs. Le modèle a été fondé sur les réactions suivantes qui se produisent entre le CO₂ et une solution aqueuse de MEA chargée.

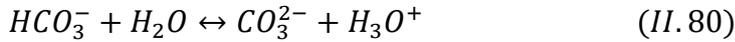
- Ionisation de l'eau:



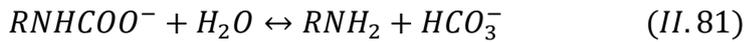
- Dissolution du CO₂ dans l'eau :



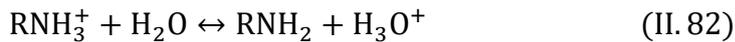
- Dissociation du bicarbonate:



- Hydrolyse du carbamate:



- Dissociation d'amine protonée:



Notant que R représente le C₂H₄OH.

D'après les réactions ci-dessus, les concentrations des espèces chimiques en question sont OH⁻, H₃O⁺, HCO₃⁻, CO₂, CO₃²⁻, RNH₃⁺, RNH₂, et RNHCOO⁻.

Dans ce contexte, [Matin et al. \(2012\)](#) ont résolu un ensemble de huit équations algébriques non linéaires (y compris les équilibres des réactions chimiques ainsi que les bilans de matière et de charge) au moyen de la méthode de Newton-Raphson pour obtenir une forme simplifiée valide du modèle de spéciation. Par conséquent, les concentrations d'équilibre résultantes sont liées par les expressions suivantes :

$$[RNH_2] = (1 - 2\alpha_A)[RNH_2]_0 \quad (II.83)$$

$$[RNHCOO^-] = \alpha_A[RNH_2]_0 \quad (II.84)$$

$$[RNH_3^+] = \alpha_A[RNH_2]_0 \quad (II.85)$$

Où $[RNH_2]$ et $[RNH_2]_0$ sont les concentrations en MEA libre et totale, respectivement.

II.2.2. Modèle cinétique

Le modèle le plus récent pour le calcul de la constante de vitesse du second ordre, celui développé par [Luo et al. \(2015\)](#), a été utilisé dans cette étude; ce modèle cinétique est basé sur le mécanisme intramoléculaire, et exprimé comme suit :

$$k_2 = k_{2,MEA}[MEA] + k_{2,H_2O}[H_2O] \quad (II.86)$$

$$k_{2,MEA} = 2.003 * 10^{10} \exp\left(\frac{-4742}{T_L}\right) \quad (II.87)$$

$$k_{2,H_2O} = 4.147 * 10^6 \exp\left(\frac{-3110}{T_L}\right) \quad (II. 88)$$

Ce modèle cinétique est valable dans les intervalles de température, de la concentration de MEA, et de la charge du CO₂ de (298-343) K, (1 et 5) M, et (0-0,4) mol_{CO2}/ mol_{MEA}, respectivement.

II.2.3. Facteur d'accélération

Le transfert de matière du CO₂ en phase liquide est amélioré par l'absorption chimique par rapport à l'absorption physique. Ainsi, le facteur d'accélération est exprimé comme suit :

$$E = \frac{k_{L,A}}{k_{L,A}^0} \quad (II. 89)$$

Pour la réaction réversible de (m+n)^{ème} ordre, Gaspar et Fosbøl (2015) ont introduit un nouveau modèle implicite pour le calcul du facteur d'amélioration ; ce modèle a été validé avec la solution numérique du modèle à deux films, et représenté par l'ensemble d'équations suivantes :

$$E_i = 1 + \left(\frac{C_R D_R}{\nu D_{A,L} C_{A,I}} \right) \quad (II. 90)$$

$$(1 - E_i)Y^2 + Ha(y_{A,I} - 1)Y + E_i - y_A = 0 \quad (II. 91)$$

$$Y = \sqrt{y_R^i} \quad (II. 92)$$

$$E = Ha \sqrt{y_R^i} \frac{1 - y_{A,I}}{1 - y_A} \quad (II. 93)$$

II.2.4. Compositions interfaciales

Les fractions molaires du CO₂ et de la vapeur d'eau $y_{A,I}$ et $y_{S,I}$, respectivement, du côté de l'interface de la phase gazeuse sont données ci-dessous :

$$y_{A,I} P = \frac{y_A P + \left(\frac{E k_{L,A}^0}{k_{G,A}} \right) C_A}{1 + \frac{1}{H_{CO_2,L}} \left(\frac{E k_{L,A}^0}{k_{G,A}} \right)} \quad (II. 94)$$

$$y_{S,I} = x_S \gamma_S P_S^{sat} / P \quad (II. 95)$$

Notant que le modèle considère la phase liquide comme une solution idéale. Ainsi $\gamma_S = 1$ et la loi de Raoult $y_{S,I} = x_S P_S^{sat} / P$ est valable.

Chapitre III

III. Paramètres du modèle

Toutes les corrélations et les méthodes du calcul des propriétés physico-chimiques et du transfert utilisées dans la présente étude sont citées dans le **tableau 1**. Indiquant que la sélection des propriétés en phase liquide était basée sur une analyse comparative des différentes corrélations disponibles dans la littérature.

Tableau 1. Liste des corrélations utilisées dans la présente étude pour l'estimation des propriétés physico-chimiques et du transfert.

Les propriétés de la phase liquide			
Propriété	corrélation	Propriété	corrélation
Densité de MEA pur	Jayarathna et al. (2013)	Diffusivité du N ₂ O dans l'eau	Ying et Eimer (2012)
Densité de l'eau	Kell (1975)	Diffusivité du N ₂ O dans une solution aqueuse de MEA	Ying et Eimer (2012)
Densité de la solution de MEA chargée en CO ₂	Weiland et al. (1998)	Diffusivité de MEA dans l'eau	Snijder et al. (1993)
Viscosité de l'eau	Swindells pris à partir de Weast (1984)	Tension superficielle de la solution de la MEA chargée en CO ₂	Jayarathna et al. (2013)
Viscosité de la solution de la MEA chargée en CO ₂	Weiland et al. (1998)	Capacité thermique de MEA liquide	Agbonghae et al. (2014)
Constante d'Henry du CO ₂ dans l'eau	Jamal (2002)	Capacité thermique de l'eau liquide	Agbonghae et al. (2014)
Constante d'Henry du N ₂ O dans l'eau	Jamal (2002)	Capacité thermique de la solution aqueuse de la MEA chargée en CO ₂	Agbonghae et al. (2014)
Constante d'Henry du N ₂ O dans une solution aqueuse de MEA	Jiru et al. (2012)	Enthalpie d'absorption du CO ₂ dans une solution aqueuse de MEA	Llano-Restrepo and Araujo-Lopez (2015) sur la base des données d'Arcis et al. (2011)
Diffusivité du CO ₂ dans l'eau	Ying et Eimer (2012)	Enthalpie de vaporisation	Pitzer et al. (1957)
Les propriétés de la phase gazeuse			
Propriété	corrélation	Propriété	corrélation
Densité en phase gazeuse	Soave (1972) Holderbaum et Gmehling (1991)	Diffusivité du CO ₂ en phase gazeuse	Wilke (1950)
Viscosité en phase gazeuse	Poling et al. (2001)	Conductivité thermique des gaz purs	Méthode d'Ely et Hanley prise à partir de Reid et al. (1987)
Capacité thermique en phase gazeuse	Smith et al. (2005)	Conductivité thermique en phase gazeuse	Méthode de Wassiljew-Mason-Saxen prise à partir de Poling et al. (2001)
Diffusivités binaires en phase gazeuse	Méthode de Fuller prise à partir de Poling et al. (2001)	Diffusivité de la vapeur d'eau en phase gazeuse	Expression de Blanc prise à partir de Poling et al. (2001)
Pression de la vapeur d'eau	Antoine (1888)		
Les propriétés du transfert de matière et de chaleur			
Propriété	corrélation	Propriété	corrélation
Coefficients du transfert de matière	Billet et Schultes (1999)	Coefficient du transfert de chaleur en phase gazeuse	Geankoplis (2003)
Surface interfaciale efficace	Billet et Schultes (1999)	Coefficient du transfert thermique en phase gazeuse corrigé par le transfert de matière	Pandya (1983)

Une description de ces corrélations et modèles, et les raisons de leur sélection est donnée dans les sections suivantes.

III.1. Propriétés de la phase liquide

III.1.1. Densité

III.1.1.1. Densité de MEA pure

Des données expérimentales sur la densité de MEA pure ont été déjà rapportées dans la littérature par un certain nombre d'auteurs (Leibush et Shorina, 1947; Touhara et al., 1982; Murrieta-Guevara et Rodriguez, 1984; Li et Shen, 1992; DiGuillo et al., 1992; Wang et al., 1992; Pagé et al., 1993; Maham et al., 1994; Li et Lie, 1994; Lee et Lin, 1995; Pouryosefi et Idem, 2008; Amundsen et al., 2009; Han et al., 2012). Par conséquent, plusieurs corrélations ont été développées (Murrieta-Guevara et Rodriguez, 1984; DiGuillo et al., 1992; Wang et al., 1992 ; Hsu et Li, 1997a; Weiland et al., 1998; Jayarathna et al., 2013). Ces corrélations sont présentées dans le **tableau 2**.

Tableau 2. Résumé des corrélations de la densité de MEA pure

Références	Domaine de validité	Corrélations
Murrieta-Guevara et Rodriguez (1984)	298.15-333.15 K	$\rho_R = 10^3(-3.595 * 10^{-7}t_L^2 - 8.0498 * 10^{-4}t_L + 1.03297)$
DiGuillo et al. (1992)	294.15-431.15K	$\rho_R = -6.1668 * 10^{-4}T_L^2 - 0.38724T_L + 1181.9$
Wang et al.(1992)	293.15-363.15 K	$\rho_R = 1.0325 * 10^3 - 0.7979 t_L$
Hsu et Li (1997a)	293.45-431.30 K	$\rho_R = 10^3(-5.66040 * 10^{-7}T_L^2 - 4.29990 * 10^{-4}T_L + 1.19093)$
Weiland et al.(1998)	294.15-431.15K	$\rho_R = 10^3(-5.35162 * 10^{-7}T_L^2 - 4.51417 * 10^{-4}T_L + 1.19451)$
Jayarathna et al. (2013)	298.15-423.15K	$\rho_R = -5.327 * 10^{-4}T_L^2 - 4.566 * 10^{-1}T_L + 1.195 * 10^3$

Les données expérimentales sur la densité de MEA pure rapportées par (Murrieta-Guevara et Rodriguez, 1984; Wang et al., 1992; Pagé et al., 1993; Maham et al., 1994; Lee et Lin, 1997; Pouryosefi et Idem, 2008; Amundsen et al., 2009; Han et al., 2012) ont été comparées aux corrélations données par (Murrieta-Guevara et Rodriguez, 1984; DiGuillo et al., 1992; Wang et al., 1992; Hsu et Li, 1997a; Weiland et al., 1998; Jayarathna et al., 2013) énumérées

dans le **tableau 2** afin de sélectionner la corrélation la plus appropriée. Les résultats de ces comparaisons sont présentés sur la **figure 5**. L'accord entre toutes ces corrélations et les données expérimentales pour des températures comprises entre (293,45-423,15)K est satisfaisant. Les ERM% obtenus lors de l'utilisations des corrélations proposées par (Murrieta-Guevara et Rodriguez, 1984; DiGuillo et al., 1992; Wang et al., 1992; Hsu et Li, 1997a; Weiland et al., 1998; Jayarathna et al., 2013) sont respectivement de 0,089%, 0,056%, 0,108%, 0,073%, 0,065%, et 0,049%. Nous concluons que la corrélation proposée par Jayarathna et al. (2013) fournit les résultats les plus appropriés par rapport aux autres corrélations avec la plus faible valeur d'ERM%. En outre, nous concluons également que les plages de validité des corrélations proposées par (Murrieta-Guevara et Rodriguez, 1984; DiGuillo et al., 1992; Wang et al., 1992) pourraient être étendues à (293,45-423,15) K.

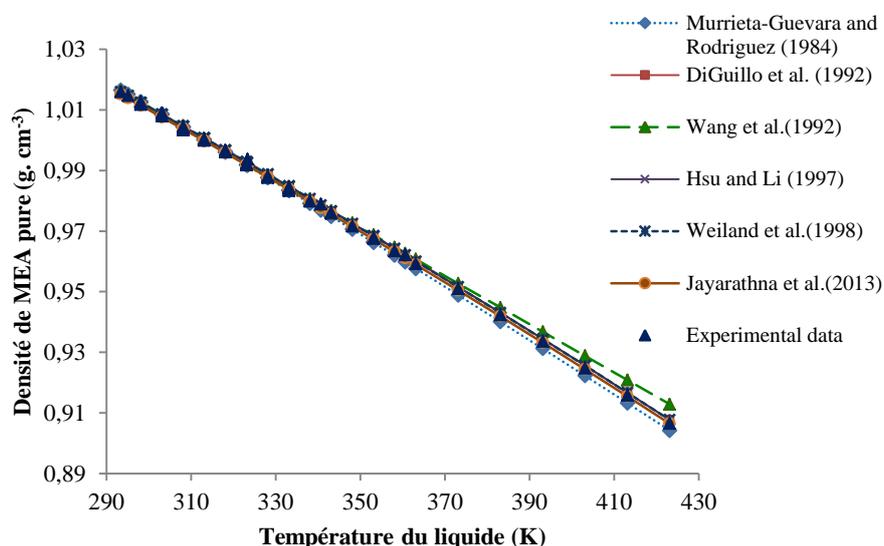


Figure 5. Comparaison entre les différentes corrélations de la densité de MEA pure

III.1.1.2. Densité de l'eau

La densité de l'eau a été déjà mesurée par de nombreux chercheurs (Comité international des poids et mesures, 1969; Kell, 1975; Touhara et al. 1982; Perry et Chilton, 1984; Al-Ghawas et al. 1989a; DiGuillo et al. 1992; Pagé et al. 1993 ; Li et Lie, 1994; Pouryosefi et Idem, 2008; Han et al. 2012) dans une large gamme de températures (jusqu'à 423K). Une liste de corrélations empiriques permettant le calcul de la densité de l'eau est fournie dans le **tableau 3**.

Tableau 3. Résumé des corrélations de la densité de l'eau

Références	Corrélations
Kell (1975)	$\rho_S = 999.83952 + 16.945176t_L - 7.9870401 * 10^{-3}t_L^2 - 46.170461 * 10^{-6}t_L^3 + 105.56302 * 10^{-9}t_L^4 - 280.54253 * 10^{-12}t_L^5)/(1 + 16.879850 * 10^{-3}t)$
Daubert et al.(1993)	$\rho_S = \frac{M_{H_2O}}{V_{H_2O}}$ $V_S = 0.18318 \exp \left\{ -1.18607 \left[1 + \left(1 - \frac{T_L}{647.13} \right)^{0.081} \right] \right\}$
Hsu et Li (1997a)	$\rho_S = 10^3(-2.57080 * 10^{-6}T_L^2 + 1.21494 * 10^{-3}T_L + 0.863559)$
Jayarathna et al. (2013)	$\rho_S = 10^3(4.007 * 10^{-6}T_L^3 - 6.875 * 10^{-3}T_L^2 + 2.74 * 10^{-4}T_L + 6.852 * 10^2)$

Les mesures de la densité de l'eau rapportées dans la littérature par (Comité International des Poids et Mesures, 1969; Al-Ghawas et al., 1989a; Pagé et al., 1993; Pouryosefi et Idem, 2008; Han et al., 2012), couvrant la plage de températures de (273,15 à 423,15) K, ont été comparées aux corrélations données par (Kell, 1975; Daubert et al., 1993; Hsu et Li, 1997a) présentées dans le **tableau 3**.

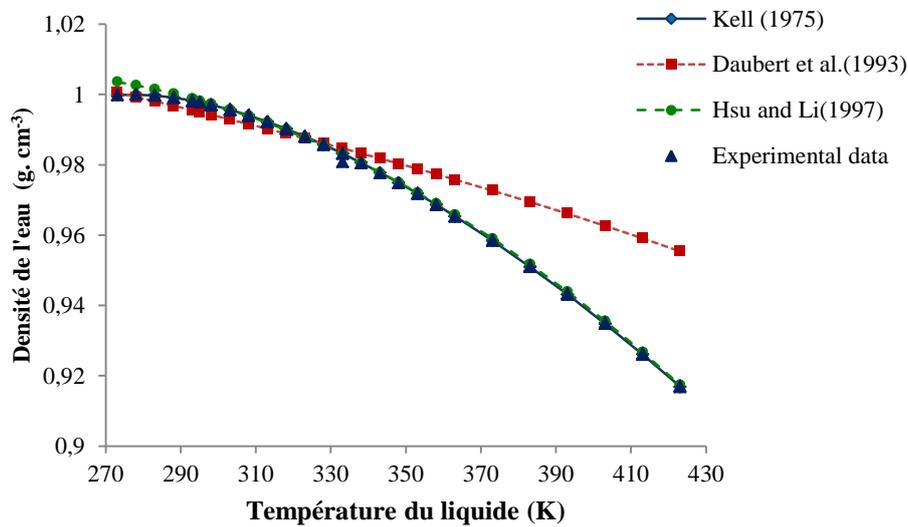


Figure 6. Comparaison entre les différentes corrélations de la densité de l'eau

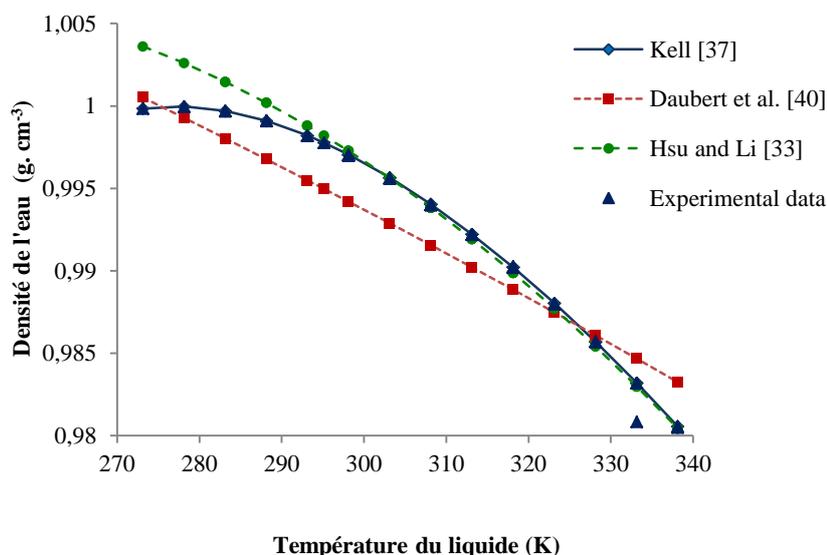


Figure 7. Agrandissement de la **figure 6** pour la comparaison entre les corrélations de la densité de l'eau

D'après les résultats de comparaison présentés dans les deux **figures 6 et 7**. Nous remarquons clairement qu'il existe un excellent accord entre les corrélations données par (Kell, 1975; Hsu et Li, 1997) et les données de la littérature sur cette plage de température, avec des ERM% égaux à 0,008% et 0,053%, respectivement. Cependant, Daubert et al. (1993) ont sous-estimé les densités de l'eau à des températures plus basses, comme le montre la **figure 7**, avec un écart égal à 0,19% qui pourrait être considéré comme acceptable et ils ont sur-estimé les densités de l'eau à des températures plus élevées; on remarque qu'au-dessus de $T_L = 333.15K$, les densités de l'eau calculées au moyen de la corrélation de Daubert s'éloignent des données expérimentales et s'écartent de 1,8%. Par conséquent, nous concluons que la corrélation proposée par Kell (1975) correspond mieux aux résultats expérimentaux que les autres corrélations basées sur le fait qu'elle fournit l'ERM% le plus faible.

III.1.1.3. Densité d'une solution aqueuse de la MEA chargée en CO_2

Les densités des solutions aqueuses de MEA chargées en CO_2 sont également importantes. Cependant, seuls quelques chercheurs ont rapporté des mesures expérimentales (Weiland et al., 1998; Pouryosefi et Idem, 2008; Amundsen et al., 2009; Han et al., 2012; Jayarathna et al., 2013). Les différentes corrélations permettant le calcul de La densité d'une solution aqueuse de MEA chargée en CO_2 (Weiland et al., 1998; Amundsen et al., 2009; Mathias et O'Connell, 2012; Han et al., 2012; Jayarathna et al., 2013) sont présentées dans le **tableau 4**.

Tableau 4. Résumé des corrélations de la densité des solutions aqueuses de MEA chargées en CO₂

Références	Domaine de validité	Corrélations
Weiland et al.(1998)	At 298.15 K 10-40 % en poids 0-0.5 mol CO ₂ / mol MEA	$\rho_L = 10^3 \left(\frac{x_R M_R + x_S M_S + x_A M_A}{V_L} \right)$ $V_L = x_R V_R + x_S V_S + x_A V_A + x_R x_S V^*$ $V_A = 0.04747 \text{ et } V^* = -1.8218$
Han et al.(2012)	298.15-413.15 K 30-60 % en poids 0.1-0.56 mol CO ₂ / mol MEA	$\rho_L = 10^3 \left(\frac{x_R M_R + x_S M_S + x_A M_A}{V_L} \right)$ $V_L = x_R V_R + x_S V_S + 10^{-6} (x_A V_A + x_R x_S V^* + x_R x_A V^{**})$ $V_A = 12.6520 - 0.4065 t_L + 9.6 * 10^{-3} t_L^2 - 7.7 * 10^{-5} t_L^3 + 1.7 * 10^{-7} t_L^4$ $V^* = -2.6676 + 1.6 * 10^{-3} t_L + 1.3 * 10^{-4} t_L^2 - 1.5 * 10^{-6} t_L^3$ $V^{**} = c + d x_R$ $c = -25.3952 + 1.2716 t_L - 0.03845 t_L^2 + 2.3 * 10^{-4} t_L^3$ $d = 73.6487 - 3.9579 t_L + 0.1029 t_L^2 - 5.9 * 10^{-4} t_L^3$
Mathias et O'Connell (2012)	298.15-353.15 K 10-40 % en poids 0-0.5 mol CO ₂ / mol MEA	<p>Ils ont utilisé la même équation empirique pour calculer la densité du liquide et le volume molaire du liquide que Weiland et al. (1998) et ils ont gardé la valeur de $V^* = -0.00182 \text{ m}^3 \cdot \text{Kmol}^{-1}$. Ils ont juste changé la valeur du paramètre V_A.</p> <p>Avec: $V_A = -0.00155 \text{ m}^3 \cdot \text{Kmol}^{-1}$</p>
Jayarathna et al.(2013)	303.15-333.15 K 16-41 %wt 0-0.5 mol CO ₂ / mol MEA	$\rho_L = \frac{x_R M_R + x_S M_S + x_A M_A}{V_L}$ $V_L = x_R V_R + x_S V_S + x_A V_A + x_R x_S V^* + x_R x_A V^{**}$ $V^{**} = 3.78 * 10^{-5} - 6.066 * 10^{-5} x_R$ $V_A = 6.516 * 10^{-7}$ $V^* = 2.396 * 10^{-6}$

Les données sur la densité des solutions aqueuses de MEA chargées en CO₂ rapportées par (Weiland et al., 1998 ; Amundsen et al., 2009 ; Han et al., 2012 ; Jayarathna et al., 2013) ont été comparées aux corrélations établies par (Weiland et al., 1998 ; Mathias et O'Connell, 2012; Han et al, 2012 ; Jayarathna et al., 2013), une fois en fonction de la charge du CO₂ à 298,15 K et à 313,15 K avec une fraction massique de MEA égale à 0,3 et une seconde fois en fonction de la température avec une charge du CO₂ et une fraction massique de MEA égales à 0,1 et 0,3, respectivement. Les résultats de ces comparaisons sont présentés dans **les figures 8 à 10**.

Selon la **figure 8** où les densités calculées et mesurées ont été présentées en fonction de la charge du CO₂ à 298,15K avec une fraction massique égale à 0,3, on observe que toutes les corrélations proposées par (Weiland et al, 1998 ; Mathias et O'Connell, 2012 ; Han et al., 2012 ; Jayarathna et al., 2013) présentent un bon accord avec les données expérimentales sur un intervalle de la charge du CO₂ de (0-0,56) mol CO₂ / mol MEA ; avec des ERM% égaux à 0,45%, 0,46%, 0,61% et 0,61%, respectivement.

La **figure 9** illustre également les densités calculées et mesurées dans une solution aqueuse de MEA chargée en CO₂ en fonction de la charge du CO₂, mais cette fois à 313,15 K; d'après cette figure, on remarque que l'accord entre les densités calculées au moyen des corrélations proposées par (Weiland et al, 1998 ; Mathias et O'Connell, 2012 ; Han et al., 2012 ; Jayarathna et al., 2013) et les densités mesurées rapportées dans la littérature sont satisfaisantes sur la même plage de la charge du CO₂, avec des ERM% égaux à 0,54%, 0,76%, 0,48% et 0,48%, respectivement.

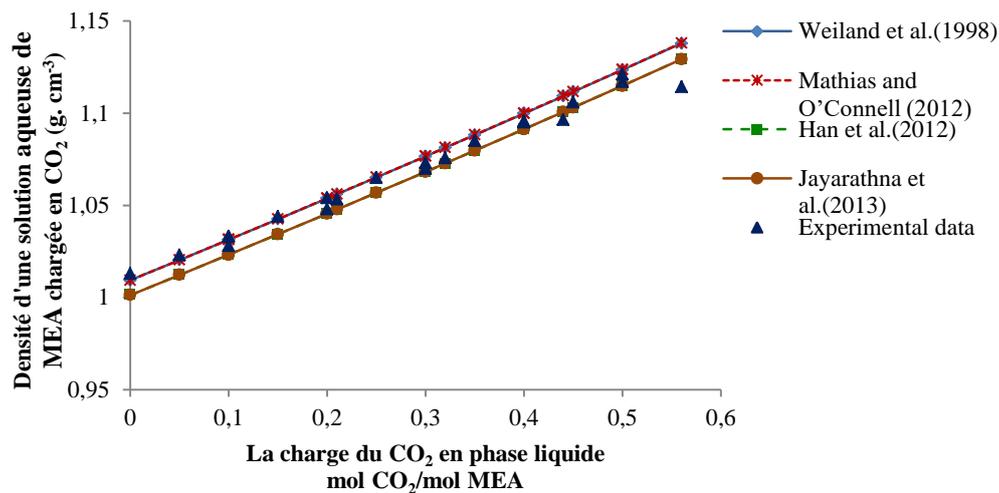


Figure 8. Comparaison entre les différentes corrélations de la densité d'une solution aqueuse de MEA chargée en CO₂ à 298,15 K et 30% en poids

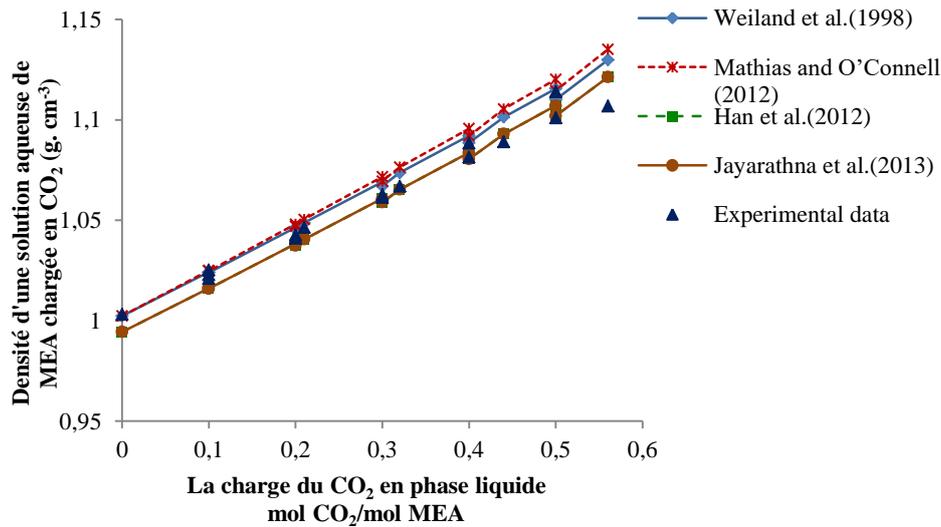


Figure 9. Comparaison entre les différentes corrélations de la densité d'une solution aqueuse de MEA chargée en CO₂ à 313,15 K et 30% en poids

Afin de parvenir à une conclusion finale, nous avons comparé les densités calculées et mesurées en fonction de la température avec une charge du CO₂ et une fraction massique égales à 0,1 et 0,3, respectivement, comme le montre la **figure 10**; où, nous pouvons voir clairement que toutes les corrélations rapportées par (Weiland et al., 1998; Mathias et O'Connell, 2012; Han et al., 2012; Jayarathna et al., 2013) présentent une bonne concordance avec les données expérimentales sur une plage de températures de (298,45-413,15) K, et avec des ERM% égaux à 0,26%, 0,26%, 0,88%, et 0,88%. L'ERM% le plus faible est donné par les corrélations de Weiland et Mathias et O'Connell. Sur la base de ces comparaisons, nous concluons que la corrélation de Weiland et al. (1998) correspond mieux aux résultats expérimentaux sur une plage de (0-0,56) mol CO₂/ mol MEA par rapports à la charge du CO₂ avec une température qui varie entre 298,15 et 413,15 K. Nous concluons également que les plages de validité en température des corrélations proposées par (Weiland et al., 1998; Mathias et O'Connell, 2012; Jayarathna et al., 2013) pourraient être étendues pour couvrir une plage plus large de (298,45-413,15) K.

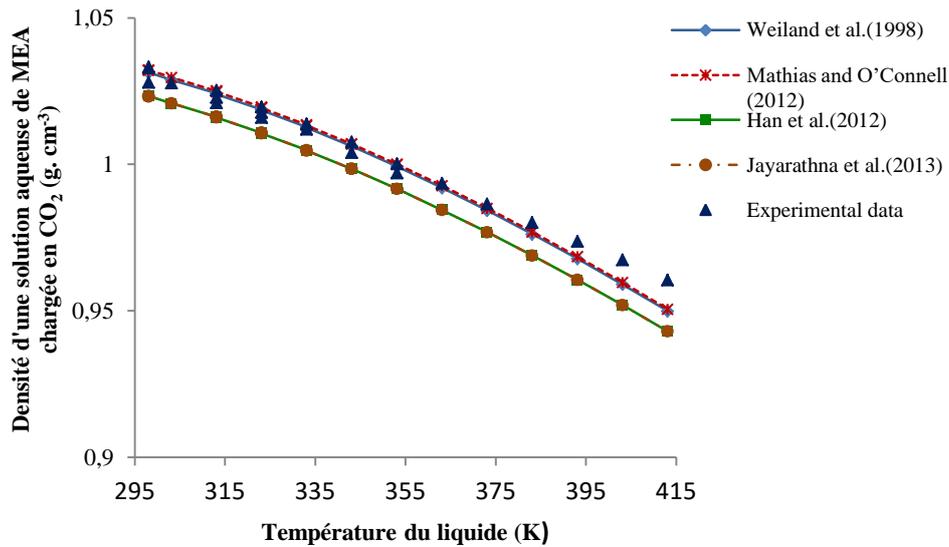


Figure 10. Comparaison entre les différentes corrélations de la densité d'une solution aqueuse de MEA chargée en CO_2 avec $\alpha_{CO_2} = 0,1$ et à 30% en poids

III.1.2. Viscosité

III.1.2.1. Viscosité de l'eau

De nombreux chercheurs ont publié des mesures sur la viscosité de l'eau à des larges intervalles de température (Yaws et al., 1976; Weast, 1984; Al-Ghawas et al., 1989a; Daubert et al., 1993; Maham et al., 2002 a, b; Maceiras et al., 2008). Une liste des corrélations empiriques permettant le calcul de la viscosité de l'eau est présentée dans le **tableau 5**.

Tableau 5. Résumé des corrélations de la viscosité de l'eau

Références	Corrélations
Swindells prise de Weast(1984)	$\log_{10} \frac{\eta_{S^*}}{\eta_{S-20}} = \frac{1.3272(20 - t) - 0.001053(t - 20)^2}{t + 105}$ $\eta_{S-20} = 1.0020 \text{ mPa.s}$ $\eta_S = 10^{-3} \eta_{S^*}$
Daubert et al. (1993)	$\eta_S = \exp\left(-52.843 + \frac{3703.6}{T_L} + 5.866 \ln(T_L) - 5.879 * 10^{-29} T_L^{10}\right)$
Hsu and Li (1997b)	$\eta_S = 10^{-3} \rho_S * \nu_S$

Les données sur la viscosité de l'eau rapportées par (Al-Ghawas et al., 1989a ; Maham et al., 2002a,b; Maceiras et al., 2008) ont été comparées aux corrélations données par (Swindells extrait de Weast,1984; Daubert et al., 1993; Hsu et Li ,1997b).

Les résultats de ces comparaisons sont présentés dans la **figure 11**. La concordance entre les corrélations proposées par (Swindells prise de Weast, 1984; Daubert et al., 1993; Hsu et Li, 1997b) et les données expérimentales pour des températures comprises entre 288,15 et 353,15K est satisfaisante pour toutes les corrélations avec des ERM% de 0,55%, 1,9% et 0,69%, respectivement. Nous concluons que la corrélation proposée par Swindells prise de Weast (1984) fournit les résultats les plus appropriés par rapport aux autres corrélations.

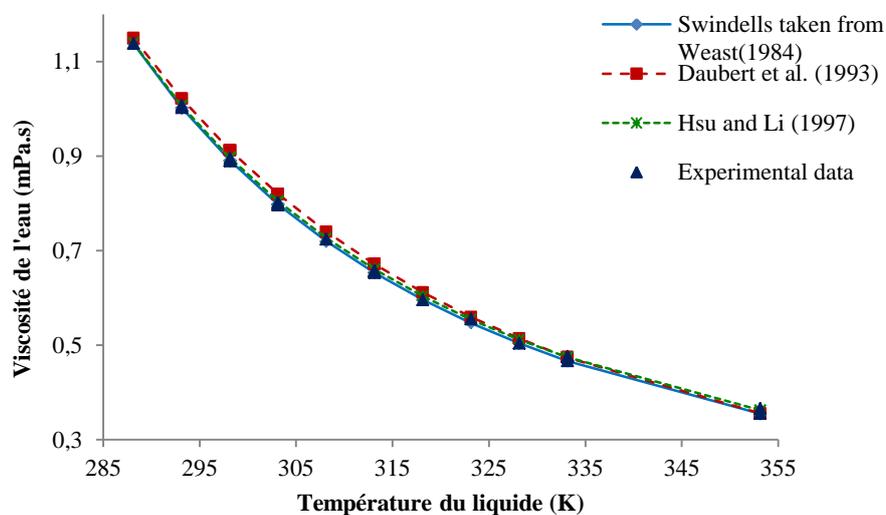


Figure 11. Comparaison entre les corrélations de la viscosité de l'eau

III.1.2.2. Viscosité d'une solution aqueuse de MEA chargée en CO₂

La seule source de corrélation sur la viscosité trouvée pour le système ternaire MEA-eau-CO₂ est Weiland et al. (1998), présentée dans le **tableau 6**, où les données à 298,15 K sont présentées avec des fractions massiques de MEA de 0,1 à 0,4. Amundsen et al. (2009) ont mesuré les viscosités des solutions aqueuses de MEA chargées en CO₂ avec des fractions massiques de MEA de 0,2 à 0,4, avec une charge du CO₂ comprise entre 0 et 0,5 mol CO₂/mol MEA à (298,15 à 353,15) K. Les données mesurées ont été comparées aux données calculées à l'aide de la corrélation de Weiland et al. (1998). Sur la base de cette comparaison, il n'était pas justifié d'établir de nouvelles corrélations car les données étaient bien représentées par les données existantes.

Tableau 6. Résumé des corrélations de la viscosité des solutions aqueuses de MEA chargées en CO₂

Corrélations	Domaine de validité	Corrélations
Weiland et al.(1998)	At 298.15 K 10-40 % en poids 0-0.5 mol CO ₂ / mol MEA	$\frac{\eta_L}{\eta_S} = 10^{-3} \exp \left\{ \frac{1}{T_L^2} * (21.186 \Omega_R + 2373) [\alpha_{CO_2} (0.01015 \Omega_R + 0.0093 T - 2.2589) + 1] \Omega_R \right\}$ $\Omega_R = 100w_R$

Les données expérimentales sur la viscosité d'une solution aqueuse de MEA chargée en CO₂ rapportées par (Weiland et al., 1998; Amundsen et al., 2009) ont été comparées avec la corrélation développée par Weiland et al. (1998), Une fois en fonction de la charge du CO₂ à différentes températures, et une autre fois en fonction de la température à différentes valeurs de la charge du CO₂.

Selon la **figure 12**, où les viscosités mesurées et calculées dans une solution aqueuse de MEA chargée en CO₂ ont été présentées en fonction de la charge du CO₂ à différentes températures (298,15K, 313,15K, 323,15K, 343,15K et 353,15k) avec une fraction massique de MEA égale à 0,3 et une charge du CO₂ comprise entre (0-0,5) mol CO₂/ mol MEA, nous remarquons que l'accord entre les données de la littérature et les corrélations proposées par Weiland et al. (1998) est satisfaisant.

En outre, selon la **figure 13**, qui illustre à la fois les viscosités mesurées et calculées dans une solution aqueuse de MEA chargée en CO₂ en fonction de la température à différentes fractions massiques de la MEA (0,2 ; 0,3 et 0,4) avec une charge du CO₂ égale à 0,1 mol CO₂/ mol MEA sur une plage de température de (298,15-353,15) K. On remarque qu'il y a un bon accord des viscosités de Weiland avec les données de la littérature à 20 et 30% en poids, avec des ERM% égaux à 3,32 et 3,05 %, respectivement. Cependant, à 40% en poids, Weiland et al. (1998) ont surestimé les viscosités avec un ERM% égale à 9,34%. Dans l'ensemble, nous concluons que même si la corrélation proposée par Weiland et al. (1998) n'est valide qu'à 298,15 k, elle montre un bon accord avec les données de la littérature sur la plage de température de (298,15 à 353,15) K à 20 et 30% en poids avec une charge du CO₂ comprise entre 0,1 et 0,5 mol CO₂/ mol MEA; par conséquent, les plages de validité pourraient être étendues à ces conditions.

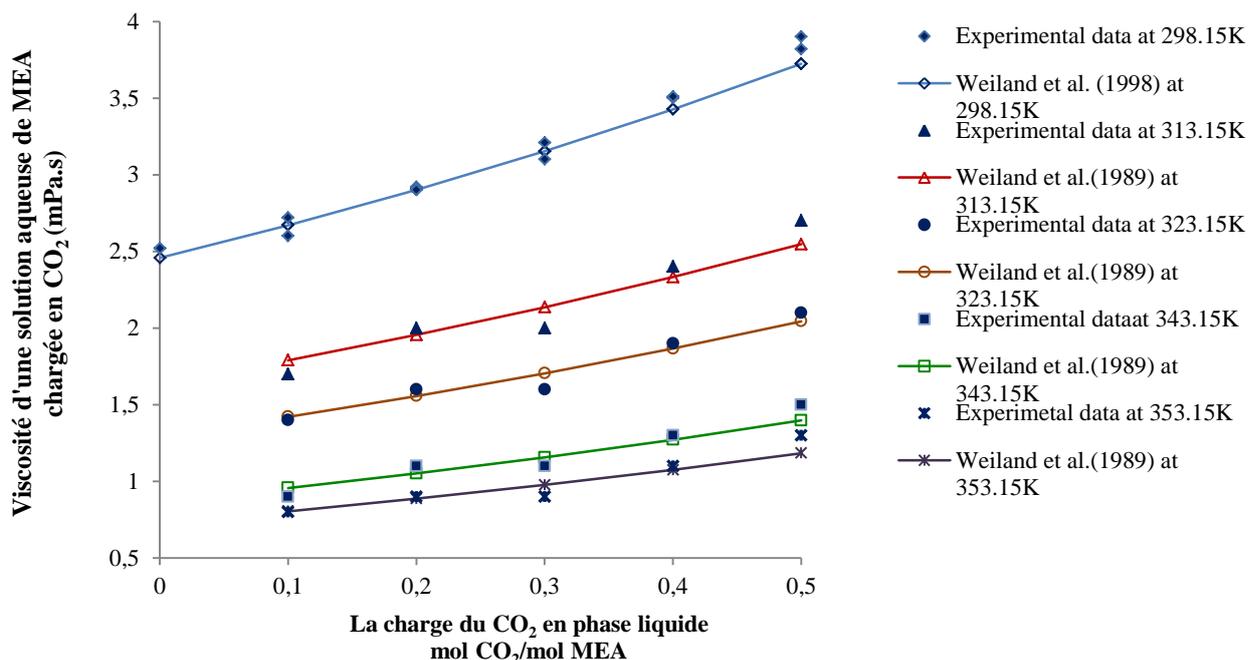


Figure 12. Comparaison entre les viscosités mesurées et calculés dans une solution aqueuse de MEA chargée en CO₂ avec 30% en poids à (298,15K, 313,15K, 323,15K, 343,15K et 353,15K)

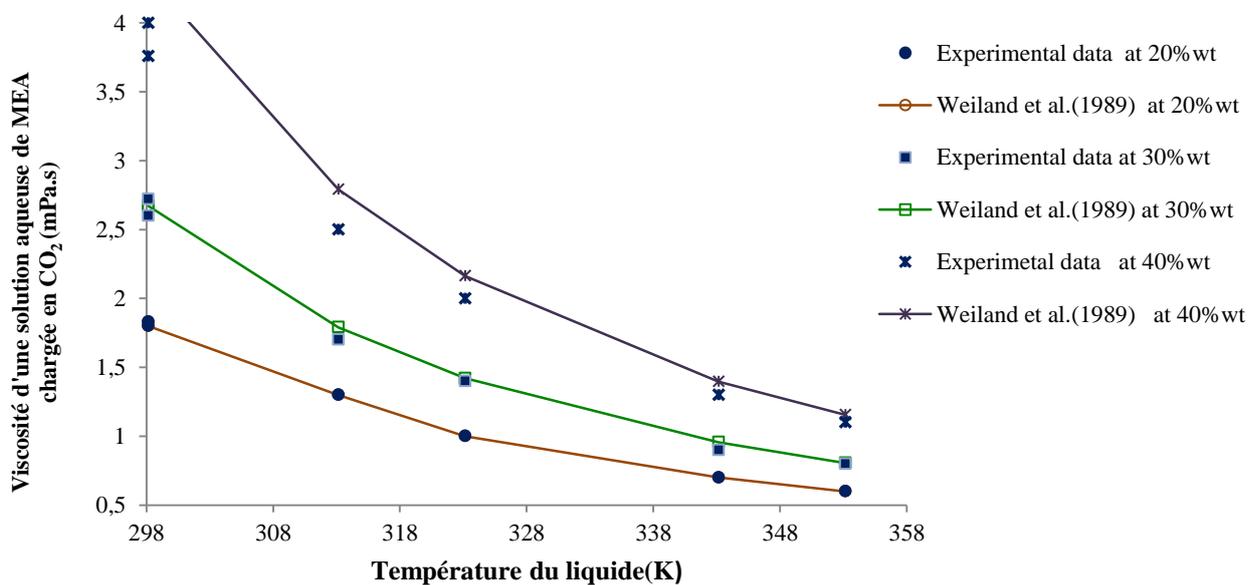


Figure 13. Comparaison entre les viscosités mesurées et calculés dans une solution aqueuse de MEA chargée en CO₂ avec $\alpha_{CO_2} = 0,1$ et à (20, 30 and 40)% en poids

III.1.3. Constante d'Henry

La solubilité physique est un paramètre clé nécessaire à la modélisation et à la conception industrielle. Il est donc essentiel d'estimer la solubilité physique du CO₂ à diverses concentrations et températures d'amines.

Comme le CO₂ réagit dans les solutions aqueuses d'amines, sa solubilité physique dans ces solutions ne peut pas être déterminée par des mesures directes et une méthode indirecte basée sur l'analogie avec le N₂O est couramment utilisée. L'analogie est basée sur l'hypothèse que le rapport des solubilités du N₂O et du CO₂ est le même dans les solutions aqueuses d'amines que dans l'eau à la même température. Compte tenu des similitudes de N₂O et de CO₂ en ce qui concerne la configuration, le volume moléculaire et la structure électronique, cette hypothèse est considérée comme raisonnable et la solubilité physique représentée par la constante d'Henry peut être estimée comme suit :

$$H_{CO_2,L} = H_{N_2O,L} \left(\frac{H_{CO_2}^\circ}{H_{N_2O}^\circ} \right) \quad (III.1)$$

Où $H_{CO_2,L}$ et $H_{N_2O,L}$ désignent les constantes d'Henry du CO₂ et du N₂O dans une solution aqueuse d'amine, et $H_{CO_2}^\circ$ et $H_{N_2O}^\circ$ désignent les constantes d'Henry du CO₂ et du N₂O dans l'eau.

III.1.3.1. Constante d'Henry du CO₂ et du N₂O dans l'eau

Les données expérimentales sur les constantes d'Henry du CO₂ dans l'eau ont été déjà rapportées par plusieurs auteurs (Perry et al.,1963; Ellis et Golding,1963; Takenouchi et Kennedy, 1964 ; Malinin, 1975; Versteeg et van Swaaij, 1988; Saha et al.,1993; Li et Lai, 1995; Li et Lee, 1996; Jamel, 2002; Jiru et al.,2012). En outre, de nombreux auteurs ont mesuré les constantes d'Henry du N₂O dans l'eau (Markham et Kobe, 1941; Perry et al., 1963; Duda et Vrentas, 1968; Sada et Kito, 1972; Joosten et Danckwerts ,1972; Sada et al.,1977; Haimour et Sandall, 1984; Versteeg et Van Swaaij, 1988; Al-Ghawas et autres, 1989; Xu et autres, 1991; Sandall et autres, 1993; Browning, 1994; Li et Lai, 1995; Li et Lee, 1996; Jamel, 2002; Jiru et autres, 2012; Jiru et Eimer, 2012). D'après ces données expérimentales, plusieurs corrélations ont été développées qui sont présentées dans le **tableau 7**.

Tableau 7. Résumé des corrélations de constante d'Henry du CO₂ et du N₂O dans l'eau

Références	Domaine de validité	Corrélations
Versteeg and Van Swaaij (1988)	291.2-359.4K	$H_{N_{20}}^{\circ} = 8.55 * 10^6 \exp\left(\frac{-2284}{T_L}\right)$
	291-360.1K	$H_{CO_2}^{\circ} = 2.82 * 10^6 \exp\left(\frac{-2044}{T_L}\right)$
Jamel (2002)	278- 393K	$\text{Log}_{10}(H_{N_{20}}^{\circ}) = 85.8485 - \frac{4373.35}{T_L} - 27.71662\text{log}_{10}(T_L) + 0.003397123 T_L$
	273- 523K	$\text{Log}_{10}(H_{CO_2}^{\circ}) = 69.39562 - \frac{3557.793}{T_L} - 22.29261\text{log}_{10}(T_L) + 0.003941096 T_L$
Penttila et al. (2011)	283.15-413.15K	$H_{N_{20}}^{\circ} = \exp\left(158.245 - \frac{9048.596}{T_L} - 20.86 \ln T - 0.00252 T_L\right)$
	273.15-433.15K	$H_{CO_2}^{\circ} = \exp\left(145.369 - \frac{8172.355}{T_L} - 19.303 \ln T_L\right)$
Jiru et al. (2012)	298.15-323.15K	$H_{N_{20}}^{\circ} = 8.449 * 10^6 \exp\left(\frac{-2283}{T_L}\right)$
	298.15-323.15K	$H_{CO_2}^{\circ} = 3.520 * 10^6 \exp\left(\frac{-2113}{T_L}\right)$

Les données expérimentales sur la constante d'Henry du CO₂ dans l'eau rapportées par un plusieurs auteurs (Perry et al.,1963; Ellis et Golding,1963; Takenouchi et Kennedy, 1964; Malinin, 1975; Versteeg et van Swaaij, 1988; Saha et al.,1993; Li et Lai, 1995; Li et Lee, 1996; Jamel, 2002) ont été comparées aux corrélations données par (Versteeg et Van Swaaij, 1988; Jamel, 2002; Penttila et al., 2011; Jiru et al.,2012). Les résultats sont présentés dans la **figure 14**.

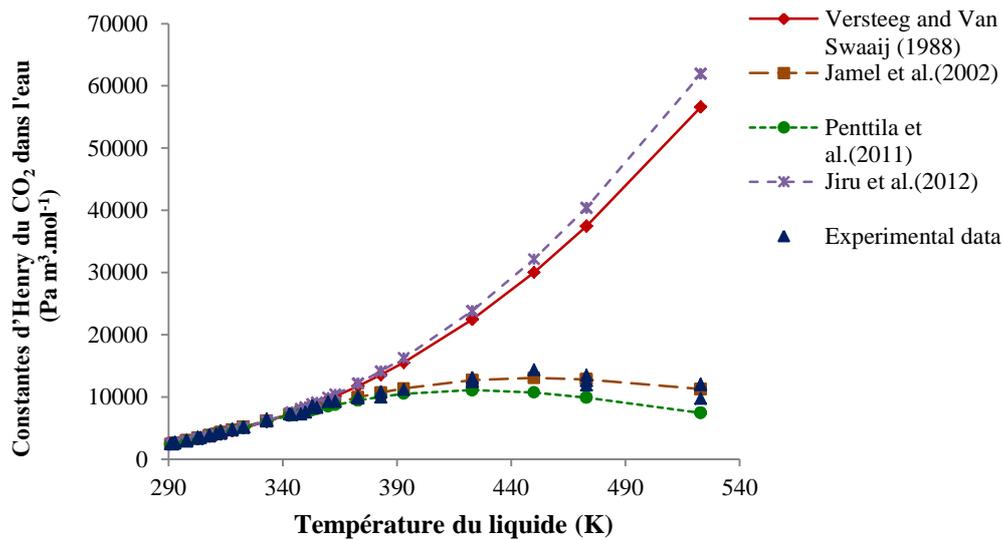


Figure 14. Comparaison entre les corrélations permettant le calcul des constantes d'Henry du CO_2 dans l'eau

Selon la **figure 14**, nous remarquons qu'il existe un bon accord entre la corrélation donnée par [Jamel, \(2002\)](#) et les données expérimentales sur une plage de températures de (273,15-523,15) K, avec un ERM% égal à 2,31%. Même si [Penttila et al. \(2011\)](#) ont sous-estimé la constante d'Henry du CO_2 dans l'eau au-dessus de $T_L=393,15$ K; cependant, l'accord avec les données expérimentales pourrait être considéré comme acceptable avec un ERM% égal à 5,79%. Les deux corrélations proposées par ([Versteeg et Van Swaaij, 1988](#); [Jiru et al.,2012](#)) ont sur-estimé la constante d'Henry du CO_2 dans l'eau à des températures élevées, elles s'écartent toutes les deux des données expérimentales avec des ERM% de 136 et 138% au-dessus des températures égales à 363 et 355K, respectivement. Par conséquent, nous concluons que la corrélation proposée par [Jamel \(2002\)](#) correspond mieux aux résultats expérimentaux que les autres corrélations sur la plage de températures de (273,15-523,15) K.

Les données expérimentales sur la constante d'Henry du N_2O dans l'eau rapportées par ([Markham et Kobe, 1941](#); [Perry et al., 1963](#); [Duda et Vrentas, 1968](#); [Sada et Kito, 1972](#); [Joosten et Danckwerts, 1972](#); [Sada et al.,1977](#); [Haimour et Sandall, 1984](#); [Versteeg et Van Swaaij, 1988](#); [Al-Ghawas et al.,1989 a](#); [Xu et al., 1991](#); [Sandall et. al., 1993](#); [Browning, 1994](#); [Li & Lai, 1995](#); [Li & Lee, 1996](#); [Jamel, 2002](#); [Jiru et al.,2012](#); [Jiru et Eimer, 2012](#)) ont été comparées aux corrélations données par ([Versteeg et Van Swaaij, 1988](#); [Jamel, 2002](#); [Penttila et al., 2011](#)). Les résultats sont présentés dans la **figure 15**.

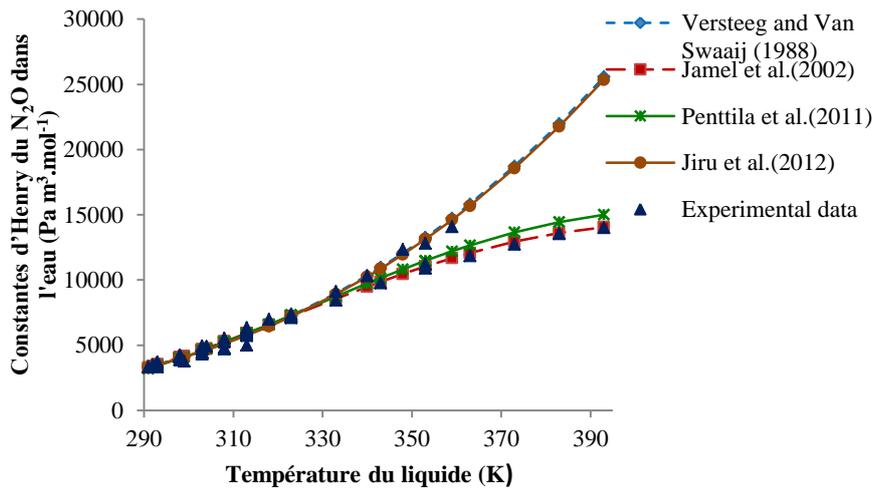


Figure 15. Comparaison entre les corrélations permettant le calcul de la constantes d'Henry du N_2O dans l'eau

Selon la **Figure 15**, nous remarquons que les deux corrélations proposées par (Jamel, 2002; Penttila et al., 2011) présentent un bon accord avec les données expérimentales sur une plage de températures de (278,15-393,15) K, avec des ERM% égaux à 4,1 et 4,9%, respectivement. Les deux corrélations proposées par (Versteeg et Van Swaaij, 1988; Jiru et al., 2012) ont surestimé la constante d'Henry du N_2O dans l'eau à haute température, elles s'écartent toutes les deux des données expérimentales avec des ERM% de 29,02 et 28,02%, respectivement, au-dessus de 343,15 K. Nous concluons que la corrélation proposée par Jamel (2002) fournit les résultats les plus appropriés par rapport aux autres corrélations avec la plus petite valeur d'ERM% sur un intervalle de température de (278,15-393,15) K.

III.1.3.2. Constante d'Henry du N_2O dans une solution aqueuse de MEA

Des mesures expérimentales de la constante d'Henry du N_2O en solution aqueuse de MEA ont été déjà publiées par un certain nombre d'auteurs (Sada et Kito, 1972; Littel et al., 1992; Wang et al., 1992; Browning et Weiland, 1994; Li et Lai, 1995; Tsai et al., 2000; Jamel et al, 2002). Grâce à ces mesures, de nombreuses corrélations ont été établies qui sont résumées dans le **tableau 8**.

Tableau 8. Résumé des corrélations de la constante d'Henry du N₂O dans les solutions aqueuses de MEA

Références	Domaine de validité	Corrélations
Wang et al (1992)	288.15-298.15 K 1-6 kmol.m ⁻³	$\ln H_{N_2O,L} = H^E + \sum_{i=1}^n \phi_i \ln H_{N_2O}^i$ $\phi_i = \frac{x_i v_i}{\sum_{i=1}^n x_i v_i}$ $H_{N_2O,MEA} = 1.207 * 10^5 \exp\left(\frac{-1136.5}{T_L}\right)$ <p>The excess Henry's constant for binary system</p> $H_{12}^E = \phi_1 \phi_2 \alpha_{12}$ $\alpha_{12} = 1.3378 + 0.1831 t_L - 4.0469 * 10^{-3} t_L^2 - 3.0540 \phi_{MEA}$
Jamel (2002)	293-355 K 1.1-30 % en poids	<p>Le modèle semi-empirique proposé par Wang et al. (1992) a été utilisé, la seule différence est le paramètre α_{12}.</p> $\alpha_{12} = -2.14841 + 1034.851/T_L$
Jiru et al.(2012)	298.15-323.15 K 0-16.4 mol.L ⁻¹	<p>Le modèle semi-empirique proposé par Wang et al. (1992) a été utilisé, la seule différence est le paramètre α_{12}.</p> $\alpha_{12} = 1.71468 + 0.03955 t_L - 0.00043 t_L^2 - 2.21209 \phi_{H_2O}$

Les données expérimentales sur la constante d'Henry du N₂O en solution aqueuse de MEA rapportées par (Sada et Kito, 1972; Littel et al.,1992; Wang et al., 1992; Browning et Weiland, 1994; Li et Lai, 1995; Tsai et al., 2000; Jamel et al., 2002; Mandal et al., 2005; Jiru et al., 2012) ont été comparées aux corrélations données par (Wang et al., 1992; Jamel, 2002; Jiru et al., 2012).

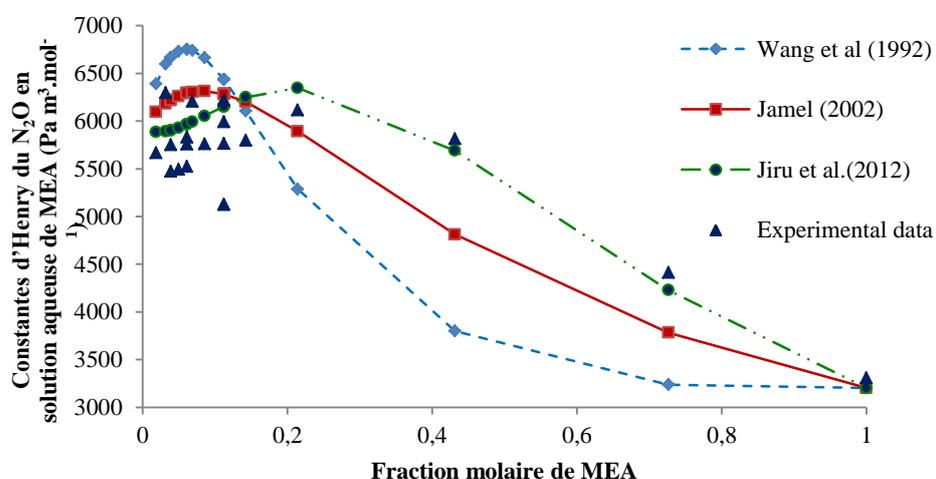


Figure 16. Comparaison entre les corrélations permettant le calcul de la constantes d'Henry du N₂O dans une solution aqueuse de MEA à 313,15 K

La **figure 16** illustre les constantes d'Henry du N_2O mesurées et calculées dans une solution aqueuse de MEA en fonction de la fraction molaire à 313,15 K. D'après ces résultats, nous remarquons que la corrélation proposée par [Jiru et al. \(2012\)](#) présente un bon accord avec les données expérimentales sur toute la plage de concentration, avec un ERM% égal à 6,13 %; cet écart est légèrement important en raison du fait que différentes données expérimentales rapportées par différents auteurs et mesurées selon différentes techniques ont été utilisées dans cette comparaison; cependant, cette corrélation pourrait être utilisée sans risque sur toute la plage de concentration à 313,15 K. De plus, [Wang et al. \(1992\)](#) ont sur-estimé la constante d'Henry du N_2O en solution aqueuse de MEA à faible fraction molaire de MEA; alors qu'au-dessus de $x_R=0,1122$, la constante d'Henry diminue rapidement par rapport aux mesures expérimentales avec un ERM% global égal à 15,7%. De plus, la corrélation proposée par [Jamel \(2002\)](#) fournit un ERM% de 9,63%, ce qui est légèrement important.

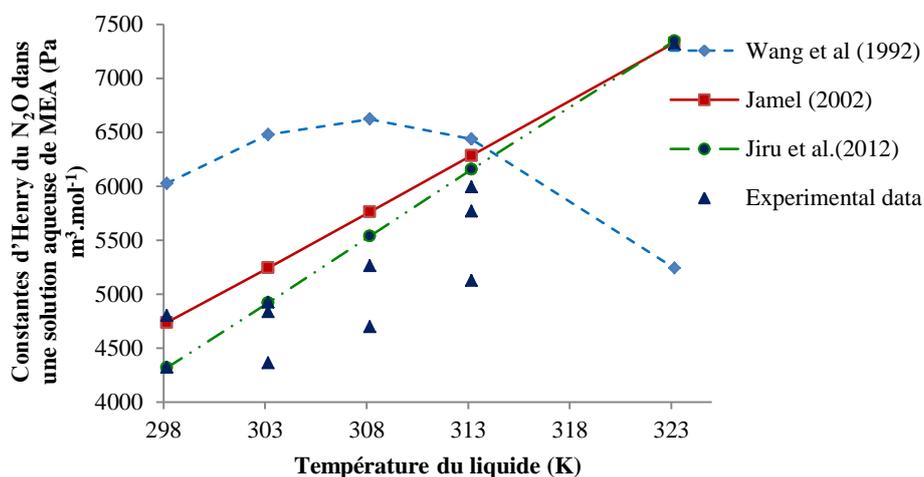


Figure 17. Comparaison entre les corrélations permettant le calcul des constantes d'Henry du N_2O dans une solution aqueuse de MEA à 30% en poids

De plus, nous avons comparé les constantes d'Henry calculées et mesurées du N_2O dans une solution aqueuse de MEA en fonction de la température à 30 % en poids sur un intervalle de (298,15-323,15) K, comme le montre la **figure 17**. Les ERM% fournis par les corrélations données par ([Jamel, 2002](#); [Jiru et al., 2012](#)) sont assez importants, ils sont égaux à 10,44 et 7,07 %, respectivement; cela est dû au fait que les données rapportées par [Li et Lai \(1995\)](#) sont très inférieures à celles rapportées dans d'autres sources pour les mêmes conditions opératoires. D'autre part, la corrélation proposée par [Wang et al. \(1992\)](#) donne un ERM% très élevé qui est égal à 29 %.

Dans l'ensemble, nous concluons que la corrélation proposée par Jiru et al. (2012) correspond mieux aux mesures expérimentales sur toute la gamme de concentration et de température (298,15-323,15) K.

III.1.4. Diffusivité du CO₂ dans les solutions aqueuses de MEA

En raison de la réaction qui se produit entre le CO₂ et les solutions d'amines, la diffusivité du CO₂ dans la solution de MEA ne peut pas être déterminée directement. C'est pourquoi Clarke (1964) a proposé la méthode de l'analogie avec le N₂O, qui a ensuite été adoptée par de nombreux chercheurs. Cette approche peut être exprimée comme suit :

$$D_{CO_2,L} = D_{N_2O,L} \left(\frac{D_{CO_2}^\circ}{D_{N_2O}^\circ} \right) \quad (\text{III. 2})$$

Diverses mesures ont été rapportées dans la littérature sur la diffusivité du N₂O dans les solutions aqueuses de MEA sur une large intervalle de concentration et de température de MEA (Clarke, 1964; Cullen et Davidson, 1957; Sada et al., 1978; Li et Lai, 1995; Ko et al., 2001; Jamel, 2002; Ying et Eimer, 2012); sur la base de ces données expérimentales, différentes corrélations ont été établies. Dans cette première partie, la corrélation la plus récente va être utilisée (Ying et Eimer, 2012), voir **le tableau 9**.

Tableau 9. Résumé des corrélations de la diffusivité du CO₂ et du N₂O dans l'eau et la diffusivité du N₂O dans les solutions aqueuses de MEA

Références	Domaine de validité	Corrélations
Ying et Eimer (2012)	298.15-333.15 K 0-12 kmol.m ⁻³	$D_{N_2O}^\circ = 5.07 * 10^{-6} \exp\left(\frac{-2371}{T_L}\right)$ $D_{CO_2}^\circ = 2.35 * 10^{-6} \exp\left(\frac{-2119}{T_L}\right)$ $D_{N_2O,L} = (5.07 * 10^{-6} - 3.5443 * 10^{-4}[MEA]_0 + 3.4294 * 10^{-3}[MEA]_0^2) * \exp\left[\frac{-2371 + 0.3749 * 10^3[MEA]_0}{T_L}\right]$

III.1.5. Diffusivité de MEA dans l'eau

La diffusivité en phase liquide D_R du MEA a été calculée au moyen de la corrélation suivante obtenue par Snijder et al. (1993), présenté dans le **tableau 10**.

Tableau 10. Corrélation permettant le calcul de la diffusivité de MEA dans l'eau

Référence	Corrélation
Snijder et al. (1993):	$D_R = \exp\left(-13.275 - \frac{2198.3}{T_L} - 7.8142 * 10^{-2} [MEA]_0\right)$

III.1.6. Tension superficielle de la solution aqueuse de MEA chargée en CO₂

Les mesures publiées sur les tensions superficielles des solutions de MEA partiellement carbonatées sont cependant rares. Jayarathna et al. (2013) ont mesuré les tensions superficielles des solutions aqueuses de MEA chargées en CO₂ avec des rapports massiques d'amine de (20 à 70)% dans une plage de température de (303,15 à 333,15) K. Ils ont développé une nouvelle corrélation, présentée dans le **tableau 11**.

Tableau 11. Corrélation permettant le calcul de la tension superficielle des solutions aqueuses de MEA partiellement carbonatées

Référence	Domaine de validité	Corrélation
Jayarathna et al. (2013)	303.15-333.15 K 20-70% (M _{MEA} /M _{MEA+H₂O}) 0-0.5 mol CO ₂ / mol MEA	$\sigma_L = p00 + p10\alpha_{CO_2} + p01 T_L + p20(\alpha_{CO_2})^2 + p11 T_L \alpha_{CO_2}$ $+ p02 T_L^2 + p30(\alpha_{CO_2})^3 + p21 T_L (\alpha_{CO_2})^2$ $+ p12 T_L^2 \alpha_{CO_2} + p40(\alpha_{CO_2})^4 + p31 T_L (\alpha_{CO_2})^3$ $+ p22(T_L \alpha_{CO_2})^2$
		Les valeurs des paramètres p00, p10, p01, p20, p11, p02, p30, p21, p12, p40, p31, and p22 à chaque rapport massique sont présentées dans le tableau 6 dans le travail de Jayarathna et al.(2013).

III.1.7. Capacité thermique

Au fil des ans, des données expérimentales sur la capacité thermique ont été rapportées pour les alcanolamines pures, les mélanges binaires d'eau et d'alcanolamines, les mélanges binaires de deux alcanolamines et les solutions aqueuses d'alcanolamines mixtes. Des données sur la capacité thermique de MEA pure ont été rapportées par de nombreux auteurs (Chueh et Swanson, 1973; Riddick et al., 1986; Lee, 1994; Lide, 1995; Chiu et al., 1999). De plus, les données sur la capacité thermique des solutions aqueuses de MEA chargées en CO₂ ont été rapportées par (Weiland et al., 1997; Hilliard, 2008); à l'aide de ces données, Agbonghae et al. (2014) ont développé un modèle semi-empirique pour estimer la capacité thermique des solutions aqueuses d'alcanolamines, à la fois avant et après l'absorption du CO₂, et les

paramètres du modèle pour plusieurs systèmes ont été obtenus à l'aide de la techniques de régression. Dans ce travail, La capacité thermique isobare molaire $C_{P,L}$ de la phase liquide a été calculée au moyen de la corrélation obtenue par [Agbonghae et al. \(2014\)](#) pour les solutions aqueuses de MEA chargées en CO_2 , listée dans le **tableau 12**.

Tableau 12. Corrélation permettant le calcul de la capacité thermique dans des solutions aqueuses de MEA partiellement carbonatées.

Référence	Domaine de validité	Corrélation
Agbonghae et al. (2014)	298.15-393.15 K 0-0.5 mol CO_2 / mol MEA	$C_{P,L} = x_{MEA}C_{P,MEA} + x_{H_2O}C_{P,H_2O} + x_{MEA}x_{H_2O}f_{RK}$ $+ (\alpha_{CO_2})^{0.4173} (C_0 + C_1x_{MEA})$ $f_{RK} = A_0 + A_1(x_{MEA} - x_{H_2O}) + A_2(x_{MEA} - x_{H_2O})^2$ <p>Avec:</p> $A_0 = -112.4265 + 0.3962T_L$ $A_1 = 199.2343 - 0.5955T_L$ $A_2 = 424.5643 - 1.3143T_L$ $C_0 = 1098.8042 + 0.7711T_L - 233.5587 \ln T_L$ $C_1 = 202.3859 - 0.8662T_L$ $C_{P,MEA} = 78.2498 + 0.293T_L$ $C_{P,H_2O} = 96.317 - 0.1241T_L + 1.5981 * 10^{-4}T_L^2 + 6.9827 * 10^{-8}T_L^3$

III.1.8. Enthalpie d'absorption du CO_2 dans une solution aqueuse de MEA

[Arcis et al. \(2011\)](#) ont également mesuré $\Delta H_{rx}^{(abs)}$ en fonction de la charge du CO_2 , pour des solutions ayant un pourcentage massique de MEA de 15 % et 30 %, à des températures de 49,4 et 99,8 °C et des pressions de 5 à 51 bars. A l'aide de ces données, [Llano-Restrepo and Araujo-Lopez \(2015\)](#) ont développé une fonction polynomiale cubique permettant le calcul de l'enthalpie d'absorption, cette corrélation est présenté dans le **tableau 13**.

Tableau 13. Corrélation permettant le calcul de l'enthalpie d'absorption dans une solution aqueuse de MEA partiellement carbonatée

Référence	Domaine de validité	Corrélation
Llano-Restrepo et Araujo -Lopez (2015) basée sur les données d'Arcis et al. (2011)	322.55 K 30%wt 5-51 bar	$-\Delta H_{rx}^{(abs)} = B_0 + B_1\alpha_{CO_2} + B_2(\alpha_{CO_2})^2 + B_3(\alpha_{CO_2})^3$ Avec: $B_0 = 111.171 - 4.62336 P + 0.0772299P^2$ $B_1 = -4.33417 + 12.6306 P - 0.222593P^2$ $B_2 = -72.9602 - 13.3031 P + 0.244333P^2$ $B_3 = 3.72612 + 7.62998 P - 0.135737P^2$

III.1.9. Enthalpie de vaporisation

Les enthalpies de vaporisation de l'eau peuvent être estimées en utilisant une méthode qui est basée sur la loi des états correspondants où l'expansion du Pitzer, qui a été approchée à la corrélation présentée dans le **tableau 14**, est l'une des plus précises et pratiques.

Tableau 14. Corrélation permettant le calcul de l'enthalpie de vaporisation dans une solution aqueuse de MEA partiellement carbonatée

Référence	Corrélation
Pitzer et al. (1957)	$\Delta H_{vap,S} = \Delta H_{vapb,S} \left(\frac{1 - T_r}{1 - T_{rb}} \right)^{0.375}$

III.2. Propriétés de la phase gazeuse

III.2.1. Densité en phase gazeuse

Afin de calculer la densité dans la phase gazeuse, l'équation PSRK basée sur l'équation d'état modifiée de Soave-Redlich-Kwong (Soave, 1972) a été appliquée (Holderbaum et Gmehling, 1991):

$$P = \frac{R T_G}{v - b} - \frac{a}{v(v + b)} \quad (III.3)$$

$$a_i = 0.42748 \frac{R^2 T_{c,i}^2}{P_{c,i}} f(T_G) \quad (III.4)$$

Pour: $T_r < 1$

$$f(T_G) = [1 + c_1(1 - T_r^{0.5}) + c_2(1 - T_r^{0.5}) + c_3(1 - T_r^{0.5})]^2 \quad (III.5)$$

Pour: $T_r > 1$

$$f(T_G) = [1 + c_1(1 - T_r^{0.5})]^2 \quad (III.6)$$

Avec :

$$c_1 = 0.48 + 1.574\omega - 0.176\omega^2 \quad (III.7)$$

Tableau 15. Paramètres des composants purs utilisés dans l'équation d'état PSRK

Composant	$T_c(K)$	$P_c(bar)$	c_1	c_2	c_3
Dioxyde de carbone	304,2	73,8	0,8252	0,2515	-0,17039
Eau	647,3	220,5	1,0783	-0,5832	0,5462
Nitrogène	126,2	33,9	0,5427	0,0000	0,0000

Par souci de simplicité, les règles de mixage généralisées d'origine ont été utilisées (Soave, 1972):

$$a = \left(\sum y_i a_i^{0.5} \right)^2 \quad (III.8)$$

$$b_i = 0.08664 \frac{RT_{c,i}}{P_{c,i}} \quad (III.9)$$

$$b = \sum y_i b_i \quad (III.10)$$

Afin de calculer le volume du gaz, nous devons d'abord résoudre l'équation d'état qui conduit à la résolution d'un polynôme du 4^{ème} degré. La résolution de ce polynôme donne 3 racines, tel que le maximum est pris comme solution.

$$M_G = \sum y_i M_i \quad (III.11)$$

$$\rho_G = \frac{M_G}{v} \quad (III.12)$$

III.2.2. Capacité thermique en phase gazeuse

Les capacités thermiques isobares molaires en phase gazeuse de A, B et S ont été obtenues à partir de la corrélation suivante (Smith et al., 2005):

$$\frac{C_{p,i}^{(g)}}{R} = A_i + B_i T + \frac{D_i}{T^2} \quad (III.13)$$

$$C_p^{(g)} = \sum y_i C_{p,i}^{(g)} \quad (III.14)$$

Les différents coefficients de l'Eq (III.13) sont présentés dans le **tableau 16**.

Tableau 16. Coefficients de l'Eq (III.13)

Composant	A_i	B_i	D_i
Dioxyde de carbone	5,457	$1,045 \cdot 10^{-3}$	$-1,157 \cdot 10^5$
Eau	3,470	$1,450 \cdot 10^{-3}$	$0,121 \cdot 10^5$
Nitrogène	3,280	$0,593 \cdot 10^{-3}$	$0,040 \cdot 10^5$

III.2.3. Diffusivités binaires en phase gazeuse

Les diffusivités binaires D_{AS} , D_{AB} et D_{SB} ont été estimées au moyen de la méthode de Fuller et al. (1966), comme indiqué par Poling et al. (2001).

$$D_{ij} = 10^{-4} \left[\frac{0.00143 T_G^{1.75}}{PM_{ij}^{0.5} \left[(\sum \nu)_i^{1/3} + (\sum \nu)_j^{1/3} \right]} \right] \quad (III.15)$$

$$M_{ij} = 2 \left[(1/M_i) + (1/M_j) \right]^{-1} \quad (III.16)$$

Tableau 17. Valeurs de $\sum \nu$ des composants purs

Composant	Dioxyde de carbone	Eau	Nitrogène
$\sum \nu$	26,9	13,1	18,5

III.2.4. Diffusivité du CO₂ en phase gazeuse

La diffusivité $D_{A,G}$ du CO₂ en phase gazeuse a été calculée en utilisant l'expression de Wilke (1950) pour la diffusivité pseudo-binaire:

$$D_{A,G} = \frac{1 - y_A}{(y_S/D_{AS}) + (y_B/D_{AB})} \quad (III.17)$$

III.2.5. Diffusivité de la vapeur d'eau en phase gazeuse

La diffusivité $D_{S,G}$ de la vapeur d'eau en phase gazeuse a été calculée en utilisant l'expression de Blanc (Poling et al., 2001) pour la diffusivité pseudo-binaire:

$$D_{S,G} = \frac{1}{(y_A/D_{AS}) + (y_B/D_{SB})} \quad (III.18)$$

III.2.6. Conductivité thermique des gaz purs

Les conductivités thermiques des gaz purs ont été estimées en utilisant la méthode des états correspondants d'Ely et Hanley comme décrit en détail par Reid et al. (1987).

$$\lambda_i = \lambda_i^* + \frac{\eta_i^*}{M_i} (1.32) \left(C_V - \frac{3R}{2} \right) \quad (III.19)$$

λ_i^* et η_i^* sont définis ci-dessous. La procédure de calcul est la suivante :

On détermine d'abord la température réduite T_r afin de définir le paramètre T^+ .

$$T^+ = T_r \quad T_r \leq 2 \quad \text{ou} \quad T^+ = 2 \quad T_r > 2 \quad (III.20)$$

$$\theta_i = 1 + (\omega - 0.011) \left(0.56553 - 0.86276 \ln T^+ - \frac{0.69852}{T^+} \right) \quad (III.21)$$

$$\Phi_i = 1 + [(\omega - 0.011)(0.38560 - 1.1617) \ln T^+] \frac{0.288}{Z_{c,i}} \quad (III.22)$$

$$f_i = \frac{T_{c,i}}{190.4} \theta_i \quad (III.23)$$

$$h_i = \frac{V_{c,i}}{99.2} \Phi_i \quad (III.24)$$

$$T_{0,i} = \frac{T_G}{f_i} \quad (III.25)$$

$$\eta_{0,i} = 10^{-7} \sum_{n=1}^9 C_n T_{0,i}^{\frac{(n-4)}{3}} \quad (III.26)$$

$$\lambda_{0,i} = 1944 \eta_{0,i} \quad (III.27)$$

Les coefficients C_n sont :

$$C_1 = 2.90774.10^6 \quad C_2 = -3.3128.10^6 \quad C_3 = 1.60810.10^6 \quad C_4 = -4.33190.10^5$$

$$C_5 = 7.06248.10^4 \quad C_6 = -7.11662.10^3 \quad C_7 = 4.32517.10^2 \quad C_8 = 1.4459.10^1$$

$$C_9 = 2.03712.10^{-1}$$

$$\lambda_i^* = \lambda_{0,i}H \quad (III.28)$$

$$\eta_i^* = \eta_{0,i}H \frac{M_i}{16.04.10^{-3}} \quad (III.29)$$

$$H = \left(\frac{16.04.10^{-3}}{M_i} \right)^{1/2} f_i^{1/2} h_i^{2/3} \quad (III.30)$$

III.2.7. Conductivité thermique en phase gazeuse

La conductivité thermique κ_G du mélange gazeux a été obtenue par la méthode de Wassiljewa-Mason-Saxena donnée par Poling et al. (2001).

$$\kappa_G = \sum_{i=1}^n \frac{y_i \lambda_i}{\sum_{j=1}^n y_j A_{ij}} \quad (III.31)$$

$$A_{ij} = \frac{\left[1 + (\lambda_{tri}/\lambda_{trj})^{1/2} (M_i/M_j)^{1/4} \right]^2}{\left[8(1 + M_i/M_j) \right]^{1/2}} \quad (III.32)$$

$$\frac{\lambda_{tri}}{\lambda_{trj}} = \frac{\Gamma_j [\exp(0.0464T_{ri}) - \exp(-0.2412T_{ri})]}{\Gamma_i [\exp(0.0464T_{rj}) - \exp(-0.2412T_{rj})]} \quad (III.33)$$

$$\Gamma_i = 210 \left(\frac{T_{c,i} M_i^3}{P_{c,i}^4} \right)^{1/6} \quad (III.34)$$

III.2.8. Pression de vapeur d'eau

La pression de vapeur de l'eau été estimée en utilisant la méthode d'Antoine (1888).

$$P_S^{sat} = 10^5 * 10^{\left[5.11564 - \frac{1687.537}{T_G + 230.17 - 273.15} \right]} \quad (III.35)$$

III.3. Propriétés du transfert de matière et de chaleur

III.3.1. Coefficient du transfert de chaleur en phase gazeuse

Le coefficient du transfert de chaleur en phase gazeuse a été estimé en utilisant la corrélation de Geankoplis (2003).

$$h_G = 1000 \cdot 4.05 \times 10^{-3} \left(\frac{\rho_G G_0}{d_h} \right)^{0.5} (C_{p,G})^{0.33} \quad (III. 36)$$

Avec :

$$d_h = \frac{4 \varepsilon}{a_p} \quad (III. 37)$$

On prend $\varepsilon=0.97$.

III.3.2. Coefficient du transfert thermique en phase gazeuse corrigé par le transfert de matière

Lorsqu'il s'agit des flux du transfert de matière importants, la correction suivante, due à Ackermann (1937) et décrite par Pandya (1983), doit être appliquée à h_G afin d'obtenir le coefficient h_G^* .

$$h_G^* a = \frac{-G_B \left(C_{p,A}^{(g)} \frac{dY_A}{dz} + C_{p,S}^{(g)} \frac{dY_S}{dz} \right)}{1 - \exp \left[\frac{G_B}{h_G a} \left(C_{p,A}^{(g)} \frac{dY_A}{dz} + C_{p,S}^{(g)} \frac{dY_S}{dz} \right) \right]} \quad (III. 38)$$

III.3.3. Corrélations du transfert de matière

Les corrélations du transfert de matière proposées par Billet et Schultes (1999) sont les plus couramment utilisées dans le cas du garnissage structurés. Dans ce travail, le coefficient du transfert de matière en phase liquide ordinaire $k_{L,A}^0$ pour le CO₂ et le coefficient du transfert de matière en phase gazeuse $k_{G,A}$ pour le CO₂ (et $k_{G,S}$ pour la vapeur d'eau) ont été calculés, en utilisant les corrélations de Billet et Schultes (1999), comme suit:

$$k_{L,A}^0 = \frac{v_L}{H_L a} \quad (III. 39)$$

$$k_{G,i} = \frac{v_G}{H_{G,i} a R T_G} \quad (III. 40)$$

Pour les présents calculs, v_L et v_G ont été calculés pour les conditions de fonctionnement réelles de la colonne, au moyen des expressions suivantes :

$$v_G = \frac{G}{\rho'_G} \quad (III.41)$$

$$v_L = \frac{L}{\rho'_L} \quad (III.42)$$

L'expression utilisée pour calculer l'aire interfaciale est la suivante

$$\frac{a}{a_p} = 1.5(a_p d_h)^{-1/2} \left(\frac{\rho_L v_L d_h}{\eta_L} \right)^{-1/5} \left(\frac{v_L^2 \rho_L d_h}{\sigma_L} \right)^{3/4} \left(\frac{v_L^2}{g d_h} \right)^{-0.45} \quad (III.43)$$

$$H_L = \frac{1}{C_L} \left(\frac{1}{12} \right)^{1/6} \left(\frac{h_L d_h}{D_{A,L} v_L} \right)^{1/2} \left(\frac{v_L}{a} \right) \quad (III.44)$$

$$H_{G,i} = \frac{1}{C_V} (\varepsilon - h_L)^{1/2} \left(\frac{d_h}{a_p^3} \right)^{1/2} \left(\frac{\rho_G v_G}{a_p \eta_G} \right)^{-3/4} \left(\frac{\eta_G}{D_{i,G} \rho_G} \right)^{-1/3} \left(\frac{v_G a_p}{D_{i,G} a} \right) \quad (III.45)$$

Les valeurs de $C_L = 1.332$ et $C_V = 0.417$ déterminées par [Fitz et al. \(1999\)](#) ont été utilisés.

Chapitre IV

IV. Simulation

IV.1. Programme informatique du modèle de la colonne d'absorption

Pour la simulation de la colonne d'absorption, fonctionnant en contre-courant, seules les conditions d'écoulement du gaz et du liquide d'entrée sont connues. Les conditions de la sortie du gaz et du liquide sont, au mieux, partiellement spécifiées. Cela conduit à un problème de valeur limite du point de remorquage où la méthode de tir (shooting method) pour résoudre ce type de problème est recommandée. Habituellement, la concentration du CO_2 du flux de gaz de sortie est spécifiée; cependant, la température et la teneur en humidité du gaz de sortie sont supposées être en équilibre avec le liquide d'entrée. En utilisant cette hypothèse, l'état du liquide de sortie, s'il n'est pas mesuré, peut être déterminé en appliquant des bilans de masse et d'énergie globaux autour de la colonne. Ensuite, la procédure de la méthode de tir commence au bas de la colonne et se déplace vers le haut, calculant les profils de température et de concentration le long de la colonne, jusqu'à ce que la concentration du CO_2 spécifiée dans le flux de gaz de sortie soit atteinte. Les conditions obtenues en haut de la colonne sont comparées aux valeurs supposées pour tester la convergence actuelle. Si les critères de convergence ne sont pas satisfaits, de nouvelles estimations des conditions du gaz de sortie sont faites et la procédure est répétée. L'organigramme simplifié de la **figure 18** représente ces principales procédures intégrées dans le programme Matlab pour simuler le processus d'absorption du CO_2 -Amine.

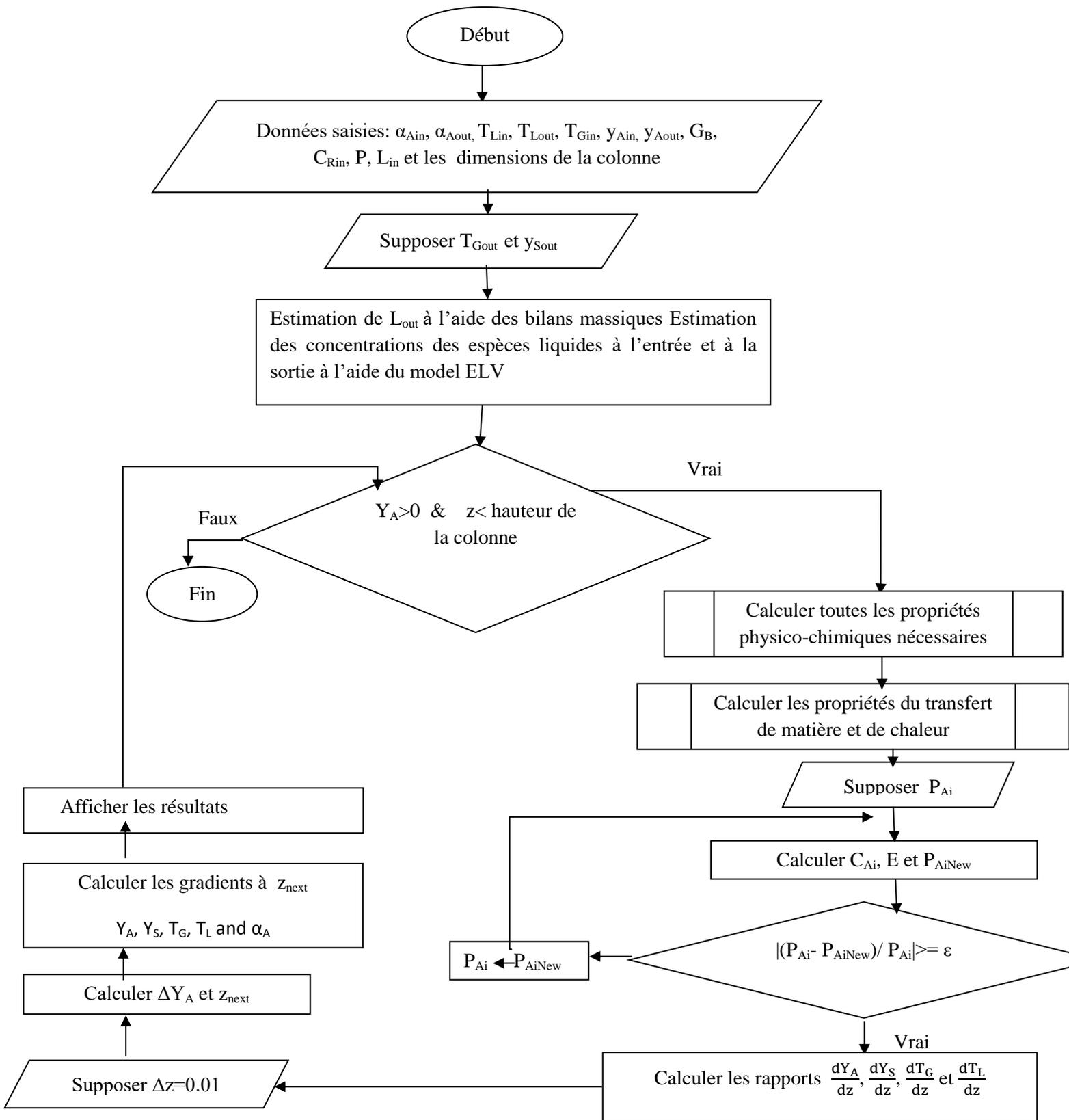


Figure 18. Organigramme de la simulation du modèle.

IV.2. Cas d'étude expérimentale

Dans ce travail et afin de valider le modèle; les données expérimentales rapportées par [Sonderby et al. \(2013\)](#) ont été utilisées. Dans cette section, une description détaillée de la colonne d'absorption et les résultats obtenus sont donnés.

IV.2.1. Description de la colonne

[Sonderby et al. \(2013\)](#) ont utilisé une colonne d'absorption à l'échelle pilote comme le montre la **figure 19**. La colonne a une hauteur totale de 10,5 m et un diamètre interne de 0,1 m. Elle est faite du verre pyrex et garnie avec du Sulzer Mellapak 250Y. La colonne se compose de 10 sections de 1,0 m de hauteur chacune. Les redistributeurs sont situés entre les sections. La hauteur du garnissage pour chaque section est de 0,82 m et ainsi une hauteur d'absorption effective maximale de 8,2 m peut être obtenue. Le diamètre de la garniture est de 0,084 m. Le liquide peut être introduit toutes les deux sections, c'est-à-dire tous les deux mètres. Ceci est fait afin de faire varier la hauteur effective du garnissage. L'alimentation en gaz non traité est introduite en pied de colonne. La colonne fonctionne en mode contre-courant ; le gaz circulant vers le haut entre en contact avec le liquide s'écoulant dans la colonne.

Des échantillons du liquide peuvent être prélevés dans chaque section à l'aide des vannes d'échantillonnage sur mesure, V1-V10 comme le montre la **figure 19**. Celles-ci se composent d'anneaux spéciaux de collecte du liquide qui sont fixés dans les connecteurs de section. Des échantillons peuvent également être prélevés dans les réservoirs de stockage T1 et T2.

Des sondes de température Pt100 sont insérées entre chaque section. Des sondes de température supplémentaires sont placées aux entrées et sorties et dans la phase gazeuse nettoyée recyclée. Trois transmetteurs de pression de Bugh & Bønsøe (la série Tensto 6300) sont placés en bas, au milieu et en haut de la colonne, comme indiqué par PI1, PI6 et PI11.

La composition de la phase gazeuse est mesurée à l'entrée et à la sortie de la colonne, Ci1 et Ci2 sur la **figure 19**. Les émetteurs du dioxyde de carbone utilisés sont des Vaisala CARBOCAP® série GMT221. Celles-ci couvrent une plage de 0 à 20% du CO₂, avec une précision attendue de $\pm 2\%$ de la lecture à pleine échelle. Le débit est mesuré manuellement par quatre rotamètres calibrés FI1 – FI4.

Dans la partie supérieure de l'absorbeur, il y a un antibuée avec un purgeur de vapeur pour s'assurer qu'aucun solvant n'est recyclé avec le courant de gaz. Il est possible de refroidir le gaz du recyclage avec l'échangeur de chaleur HE1, bien que cela n'ait pas été utilisé pour ces expériences. Deux réservoirs de stockage d'un volume de 1000 L chacun sont situés à côté de la colonne. Avant qu'une analyse ne commence, une solution mère de la composition souhaitée est préparée et stockée dans l'un des réservoirs. Les réservoirs de stockage sont suffisamment grands pour collecter le liquide de plusieurs cycles. Cela donne la possibilité d'effectuer des expériences similaires avec la même concentration de MEA et le chargement pauvre de la solution. Un réservoir de stockage contient le solvant riche utilisé tandis que l'autre contient du solvant frais avec une charge connue.

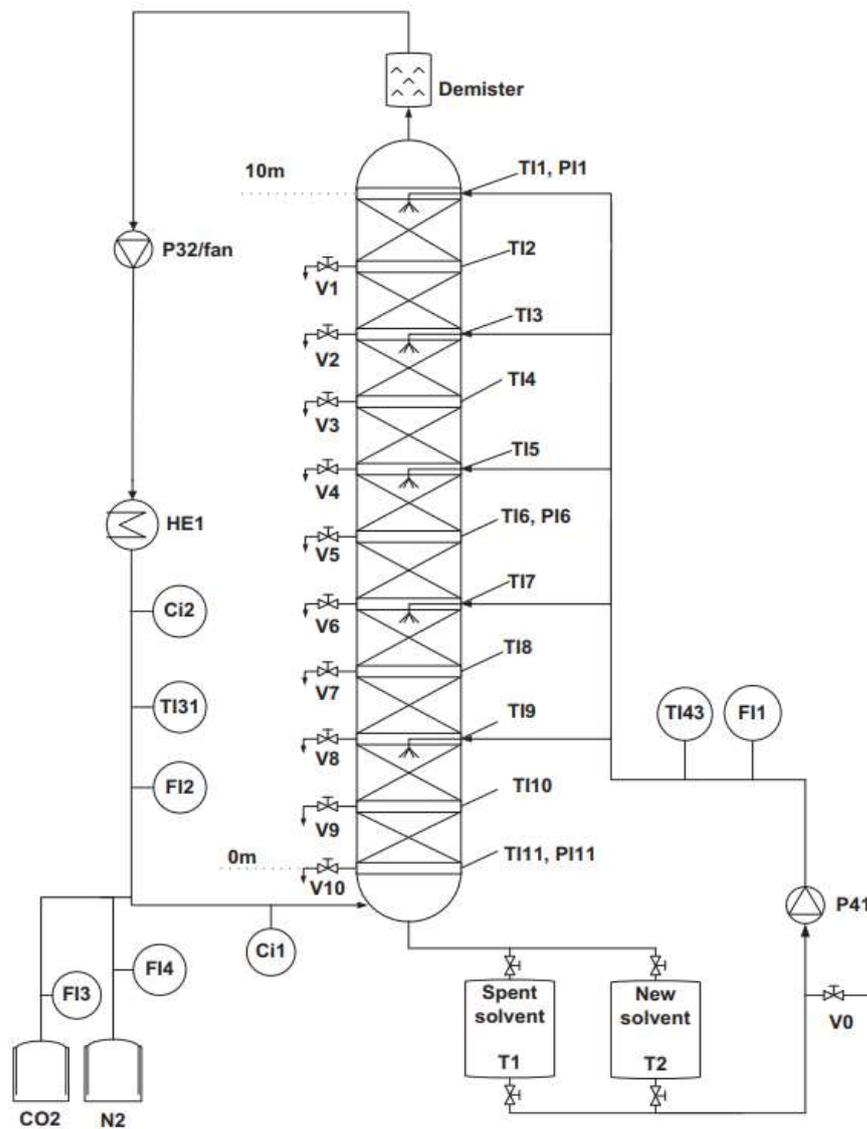


Figure 19. Schéma simplifié de la tuyauterie et de l'instrumentation de l'unité d'absorption du CO₂ à l'échelle pilote

IV.2.2. Résultats expérimentaux

Au total, 23 expériences à l'état d'équilibre ont été réalisées, numérotées R1- R23. Les essais sont divisés en deux catégories principales: les essais R1-R20 où la hauteur d'absorbeur et le rapport L/G varient, et les essais R21- R23 où la charge du CO_2 en liquide pauvre varie. Toutes les autres variables du processus ont été maintenues constantes.

Les résultats sont résumés dans les **tableaux 18-20**. Ils décrivent les conditions du fonctionnement et les propriétés mesurées du bas vers le haut de l'absorbeur. Le **tableau 18** montre les flux et les bilans massiques, les profils de température sont indiqués dans le **tableau 19** et les profils de la charge du CO_2 sont donnés dans le **tableau 20**.

Tableau 18. Conditions opératoires

Essais	Hauteur de l'absorbeur (m)	FI2 (L/min)	FI3 (g/min)	FI1 (L/min)	Ci1 (%)	Ci2 (%)	L/G (mol/mol)	Pression externe (mbar)	Température Ambiante (°C)
R 1	8,2	519	110,4	2,1	9,3	0,1	3,9	1005	22
R 2	8,2	523	112,2	3,0	9,3	0,1	5,5	1005	22
R 3	8,2	509	112,2	4,2	9,3	0,0	7,9	1017	22
R 4	8,2	507	112,2	6,0	9,3	0,0	11,3	1005	22
R 5	8,2	466	113,2	8,9	10,5	0,0	17,7	1000	21
R 6	6,6	522	112,2	2,1	9,5	0,2	3,9	1005	22
R 7	6,6	524	113,2	3,0	9,4	0,2	5,5	1005	22
R 8	6,6	511	112,2	4,2	9,7	0,1	7,9	1017	23
R 9	6,6	508	112,2	6,0	9,4	0,0	11,3	1005	22
R 10	6,6	490	111,3	6,0	9,8	0,2	11,4	1000	21
R 11	4,9	516	108,6	2,1	9,5	1,0	3,9	1000	21
R 12	4,9	542	108,6	3,0	9,4	0,9	5,3	1000	21
R 13	4,9	526	111,3	4,2	10,1	0,8	7,5	1000	21
R 14	4,9	522	106,7	4,2	9,6	0,7	7,7	1017	23
R 15	4,9	501	111,3	6,0	10,1	0,7	11,1	1000	21
R 16	4,9	468	111,3	9,1	10,4	0,1	18,1	1000	21
R 17	3,3	513	110,4	2,1	9,2	1,6	3,9	1000	21
R 18	3,3	523	111,3	4,2	10,9	2,1	7,8	1017	23
R 19	3,3	486	111,3	9,1	10,2	0,4	17,5	1000	21
R 20	1,6	498	110,4	9,1	9,7	0,8	17,3	1000	21
R 21	8,2	503	106,7	4,2	9,6	0,4	8,1	1000	21
R 22	8,2	502	107,6	4,2	9,9	0,6	8,1	1000	21
R 23	8,2	499	106,7	4,2	10,2	0,9	8,2	1000	21

Tableau 19. Températures moyennes dans le système pendant le fonctionnement en régime permanent.

Essais	TI1 (°C)	TI2 (°C)	TI3 (°C)	TI4 (°C)	TI5 (°C)	TI6 (°C)	TI7 (°C)	TI8 (°C)	TI9 (°C)	TI10 (°C)	TI11 (°C)	TI31 (°C)	TI43 (°C)
R 1	20,8	21,4	21,3	22,6	23,6	26,3	29,5	37,1	47,9	52,6	39,2	26,4	20,2
R 2	20,7	21,0	20,8	21,8	22,5	22,5	26,3	29,7	35,2	45,7	39,7	26,7	19,9
R 3	23,5	23,8	24,0	24,2	24,6	24,6	27,0	29,1	30,3	38,4	35,2	28,2	23,2
R 4	20,3	20,3	20,1	20,5	20,8	20,8	22,8	24,2	25,8	30,1	30,8	26,9	19,6
R 5	20,0	20,1	20,0	20,1	20,3	20,3	21,4	22,2	23,4	25,8	27,8	24,8	19,7
R 6			20,8	21,7	23,2	25,6	28,9	35,0	42,9	49,2	38,8	27,3	20,3
R 7			20,5	21,1	22,0	23,7	25,5	28,8	32,9	40,2	37,2	27,2	20,0
R 8			23,7	24,2	24,5	25,8	27,1	29,1	29,6	38,2	35,0	28,2	23,1
R 9			20,1	20,3	20,6	21,4	22,4	24,0	25,2	29,1	30,2	27,1	19,6
R 10			19,9	20,2	20,6	21,5	22,4	24,0	25,7	30,3	30,0	24,2	19,6
R 11					20,8	23,7	27,0	35,1	50,9	53,7	39,1	23,6	19,9
R 12					22,6	23,0	25,2	28,4	34,7	44,1	40,4	26,0	19,9
R 13					21,9	22,4	23,3	25,4	29,8	35,5	35,0	25,9	19,8
R 14					23,6	25,2	26,5	28,6	29,6	38,2	36,4	26,7	23,1
R 15					21,6	21,2	22,1	23,6	25,8	29,4	30,6	26,0	19,7
R 16					20,9	20,5	21,1	21,8	23,0	25,3	27,6	25,0	19,5
R 17							23,2	27,0	39,4	50,5	39,9	24,0	19,9
R 18							27,0	26,9	27,9	37,3	35,8	28,5	23,1
R 19							21,7	21,2	22,4	24,6	26,9	24,8	19,4
R 20									24,0	22,5	24,9	24,5	19,4
R 21	24,0	25,0	24,8	25,6	26,3	28,1	29,6	31,7	34,6	38,4	35,8	26,6	24,0
R 22	26,1	27,4	27,1	28,1	29,0	31,1	32,7	34,9	37,8	41,2	37,6	27,2	26,3
R 23	27,9	29,4	29,0	30,2	31,3	33,5	35,4	37,6	40,7	43,1	39,4	27,8	28,1

Tableau 20. Charges du CO₂ moyennes dans le système pendant le fonctionnement en régime permanent

Essais	V0 Réservoir	V1 8.2m	V2 7.38m	V3 6,56m	V4 5,74m	V5 4,92m	V6 4,1m	V7 3,28m	V8 2,46m	V9 1,64m	V10 0,82m
R 1	0,112										0,356
R 2	0,112										0,286
R 3	0,112	0,113	0,115	0,117	0,120	0,127	0,132	0,141	0,159	0,215	0,214
R 4	0,112										0,190
R 5	0,112	0,115	0,117	0,115		0,122	0,117	0,118	0,136	0,145	0,165
R 6	0,112										0,325
R 7	0,112										0,275
R 8	0,112			0,115	0,117	0,132	0,131	0,143	0,171	0,217	0,211
R 9	0,112										0,187
R 10	0,112								0,151	0,178	0,187
R 11	0,112					0,125	0,133	0,160	0,186	0,264	0,325
R 12	0,112								0,175	0,254	0,288
R 13	0,112								0,161	0,207	0,217
R 14	0,112					0,118	0,124	0,132	0,156	0,206	0,212
R 15	0,112								0,147	0,176	0,184
R 16	0,112										0,149
R 17	0,112								0,172	0,211	0,291
R 18	0,112							0,125	0,149	0,207	0,206
R 19	0,112										0,165
R 20	0,112										0,165
R 21	0,254	0,252			0,247		0,274		0,297	0,341	0,338
R 22	0,271		0,281		0,293		0,299		0,334	0,364	0,364
R 23	0,300		0,314		0,323		0,336		0,364	0,387	0,387

IV.3. Validation du modèle

Dans cette section, les résultats de la simulation obtenus lors de la modélisation et de la simulation de l'absorption réactive du CO₂ avec une solution aqueuse de MEA chargée ont été validés en utilisant les données expérimentales d'une colonne à l'échelle pilote rapportées par [Sonderby et al. \(2013\)](#). Les résultats sont présentés en termes de température du liquide et du gaz, de la charge du CO₂ en phase liquide ainsi que les profils des fractions molaires du dioxyde de carbone et de la vapeur d'eau en phase gazeuse le long de la hauteur de la colonne garnie.

Dans cette étude, le pourcentage d'écart relatif moyen ERM% a été utilisé pour comparer les prédictions du modèle avec les données expérimentales, et il a été calculé au moyen de l'équation suivante :

$$\text{ERM}\% = 100 * \frac{1}{n} \sum_1^n \left(\frac{x_i^{\text{cal}} - x_i^{\text{Exp}}}{x_i^{\text{Exp}}} \right) \quad (24)$$

Où x_i^{Exp} and x_i^{cal} sont les paramètres du processus expérimentaux et calculés du composant i, respectivement.

IV.3.1. Profils de température

Le profil de température prédit obtenu en utilisant le modèle basé sur le taux est très significatif car il dépend de nombreux paramètres du modèle, par exemple, l'enthalpie d'absorption, la solubilité du CO₂ dans les solutions d'amines, le modèle cinétique, les propriétés thermiques et massiques, et d'autres propriétés physico-chimiques.

La colonne à garnissage modélisée dans cette étude fonctionne en mode « contre-courant ». Le solvant pauvre et les gaz de combustion riches en CO₂ sont soutirés respectivement en haut et en bas de la colonne. La température du liquide descendant du haut est augmentée en raison de la chaleur libérée sous l'effet de l'absorption réactive du CO₂ dans la solution d'amine; d'autre part, les gaz de combustion circulant du bas en haut reçoivent une partie de la chaleur dégagée par le solvant riche et augmentent la température des gaz de combustion du bas de la colonne vers le haut jusqu'au sommet. En outre, la chaleur de réaction provoque la vaporisation de l'eau qui est ensuite condensée en raison du solvant plus froid provenant du haut de la colonne. On peut donc observer une importante courbure de température, comme le montrent les deux courbes de la **figure 20**, qui donnent les profils de température de l'absorbeur. Ces courbes indiquent que l'emplacement et l'ampleur de la courbure de température sont influencés par de nombreux paramètres tels que, le rapport liquide-gaz, le point d'absorption du CO₂ dans la solution d'amine et la chaleur de réaction (Kvamsdal et Rochelle, 2008).

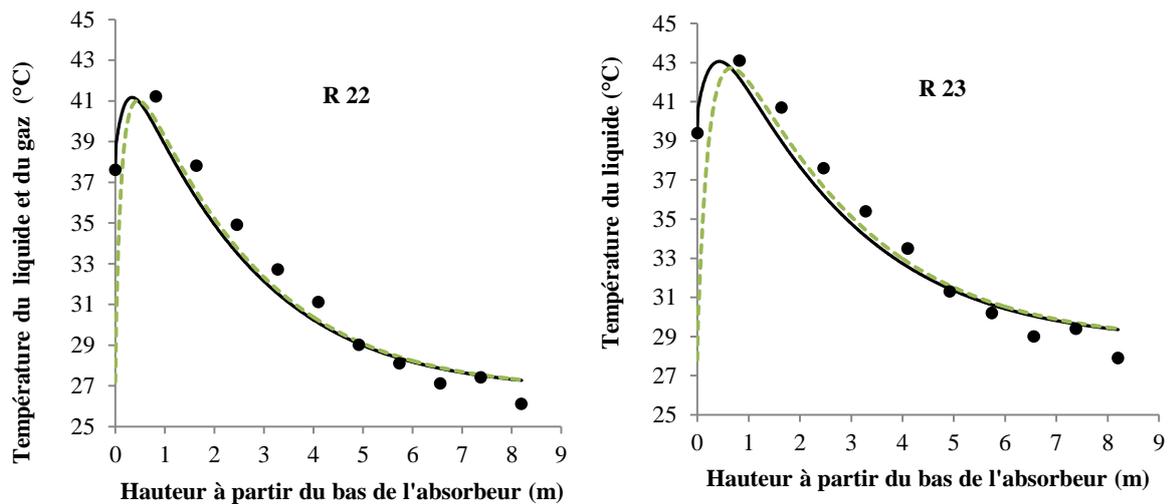


Figure 20. Profils des températures en phase liquide et gazeuse le long de la hauteur de l'absorbeur pour les deux essais R 22 et R 23. Cercles remplis : données expérimentales ; lignes courbes pleines et pointillées : résultats de simulation pour les températures de la phase liquide et de la phase gazeuse, respectivement

La **figure 20** montre les températures prédites en phase liquide et en phase gazeuse le long de la hauteur de l'absorbeur, comparées aux profils expérimentaux en phase liquide pour les essais R 22 et R 23 de [Sonderby et al. \(2013\)](#). Selon cette figure, la température de la phase liquide près du fond dépasse la température de la phase gazeuse; cependant, dans la plus grande partie de la colonne c'est l'inverse qui est observé, la température de la phase gazeuse dépassant légèrement la température de la phase liquide. Il a également été remarqué qu'un accord global entre les températures mesurées et prédites du liquide est généralement bon pour les deux essais (R 22 et R 23) avec un pourcentage d'écart relatif moyen ERM% de 2,530% et 2,593%, respectivement. Néanmoins, la température du liquide est quelque peu sur-estimée dans les 2 derniers mètres de l'absorbeur pour les deux essais, ce qui pourrait s'expliquer par l'utilisation des corrélations empiriques pour estimer les différents paramètres du modèle affectant les profils de température (modèle cinétique, propriétés du transport, enthalpie d'absorption, et propriétés physico-chimiques); par conséquent, une sélection judicieuse de ces paramètres est essentielle pour garantir des prévisions fiables.

IV.3.2. Profils de la charge du CO₂ en phase liquide

L'un des principaux paramètres de la conception d'une colonne d'absorption est la charge du CO₂ en phase liquide (nombre de mole du CO₂ par nombre de mole de MEA).

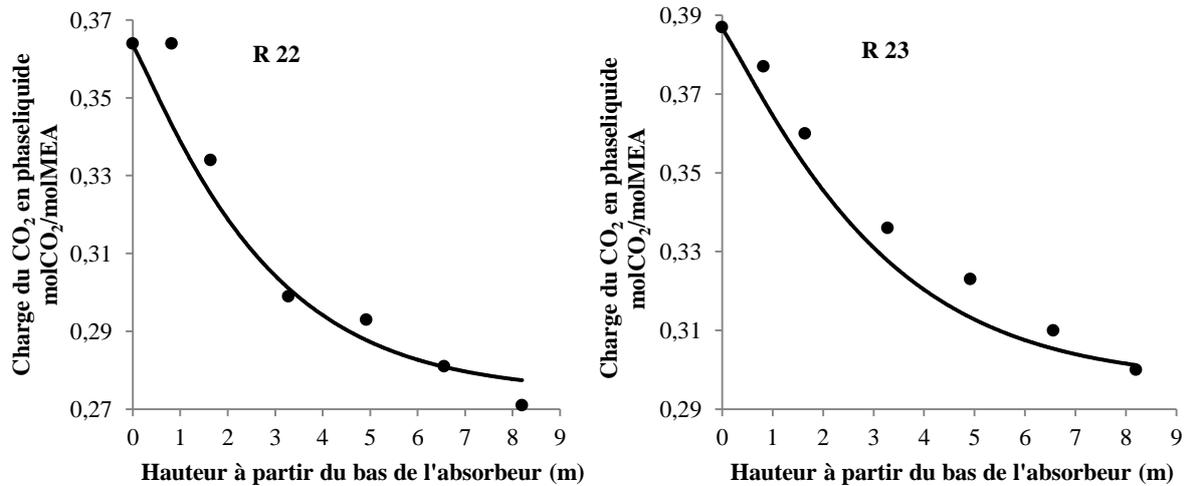


Figure 21. Profils de la charge du CO₂ en phase liquide le long de la hauteur de l'absorbeur pour les deux essais R 22 et R 23. Cercles remplis: données expérimentales; lignes pleines: résultats de la simulation

La **figure 21** illustre les profils prédits de charge du CO₂ en phase liquide, comparés aux profils expérimentaux correspondants obtenus à partir des deux essais R 22 et R 23 de [Sonderby et al. \(2013\)](#). Sur la base de cette figure, il a été constaté que les profils prédits et mesurés sont similaires pour les essais (R 22 et R 23) avec un pourcentage d'écart relatif moyen très faible (ERM%) d'environ 1,552 et 1,804, respectivement.

IV.3.3. Profils du dioxyde de carbone et de la vapeur d'eau

La **figure 22** illustre les résultats de la simulation pour les profils des fractions molaires du dioxyde de carbone et de la vapeur d'eau en phase gazeuse, comparés à ceux des fractions molaires du dioxyde de carbone mesurées, obtenues à partir des essais R 22 et R 23 de [Sonderby et al. \(2013\)](#). On remarque qu'une bonne concordance entre les données expérimentales et le résultat de la simulation dans les deux cas. Cependant, la concentration du CO₂ à la sortie de la phase gazeuse est légèrement sous-estimée dans le cas du R 22 et sur-estimée dans le cas du R 23. De plus, la fraction molaire du CO₂ en phase gazeuse diminue rapidement dans la partie inférieure de la colonne, ce qui indique que la plus grande partie de l'élimination du CO₂ a lieu dans cette région; la hauteur restante de l'absorbeur sert à réduire davantage la concentration du dioxyde de carbone pour atteindre une très faible valeur pour le flux gazeux sortant; tandis que la fraction molaire de la vapeur d'eau en phase gazeuse

augmente près de la région inférieure de l'absorbeur sous l'effet de l'évaporation de la phase liquide puis elle diminue jusqu'à atteindre une valeur asymptotique sous l'effet de la condensation en phase gazeuse.

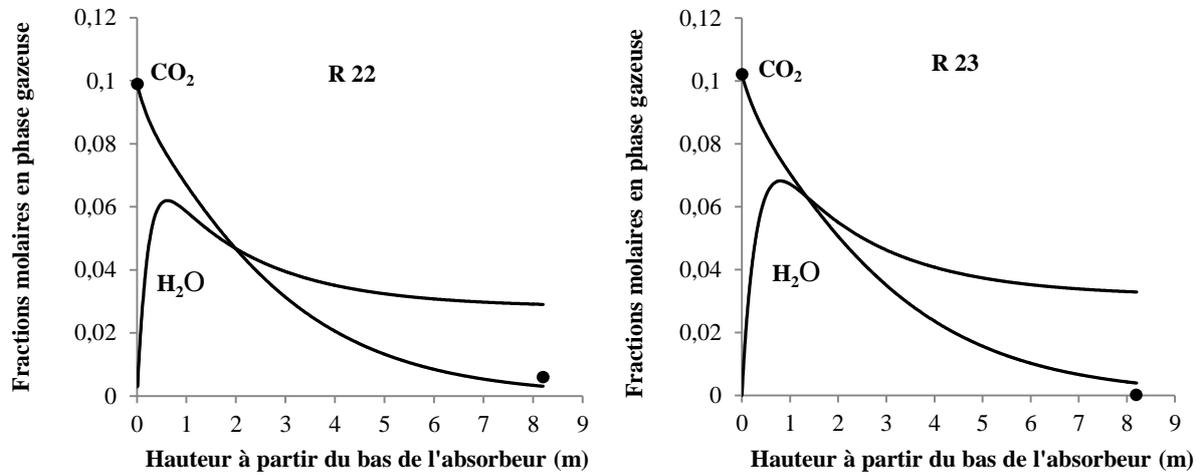


Figure 22. Profils des fractions molaires du dioxyde de carbone et de la vapeur d'eau en phase gazeuse le long de la hauteur de l'absorbeur pour les deux essais R 22 et R 23. Cercles remplis: données expérimentales; lignes pleines: résultats de la simulation

Chapitre V

V. Etude paramétrique

Le dimensionnement, la mise à l'échelle et une surveillance accrues des processus de postcombustion nécessitent l'utilisation d'une modélisation et d'une simulation précises des absorbeurs (Llano-Restrepo et Araujo-Lopez, 2015). Par conséquent, une bonne connaissance et une sélection judicieuse des paramètres du modèle sont essentielles pour garantir des prévisions rigoureuses. Dans ce contexte, plusieurs études sur divers paramètres de processus ont été publiées dans la littérature (Abu-Zahra et al., 2007; Mofarahi et al., 2008; Kvamsdal et Rochelle, 2008; Wu et al., 2010; Khan et al., 2011; Kvamsdala et Hillestad, 2012; Afkhamipour et Mofarahi, 2013, 2014).

Abu-Zahra et al. (2007) ont étudié la température d'entrée de l'absorbeur, la charge d'amine pauvre, la concentration et les sensibilités à la pression du stripper. En outre, le processus de récupération du dioxyde de carbone des gaz de combustion a été étudié par Mofarahi et al. (2008) où l'effet des conditions de fonctionnement et des paramètres de conception sur l'absorbeur et le stripper a été recherché. Par ailleurs, une analyse statistique et une combinaison entre l'analyse de sensibilité et la modélisation des réseaux neuronaux ont été réalisées par Wu et al. (2010) pour étudier les interactions entre les principaux paramètres similaires du processus. Cependant, les études sur la sélection des corrélations qui permettent le calcul des différents paramètres du modèle basé sur les taux dans les colonnes garnies sont rares. Khan et al. (2011) ont appliqué le modèle basé sur le taux pour effectuer une analyse de sensibilité ; lors de cette analyse, ils ont utilisé différents coefficients du transfert de masse dans une colonne garnie. En outre, dans le but de déterminer la position et l'ampleur de la courbure de température, Kvamsdal et Rochelle (2008) ont effectué une analyse comparative entre diverses méthodes qui permettent le calcul du coefficient du transfert de masse, de la capacité thermique du liquide et de la densité du liquide. De plus, Kvamsdala et Hillestad (2012) se sont concentrés sur la sélection des corrélations des paramètres du modèle basé sur les taux pour la prédiction des propriétés physiques et de la cinétique ; ils ont également étudié leurs effets sur les bilans de masse et d'énergie. Afkhamipour et Mofarahi (2013, 2014) ont réalisé une analyse de sensibilité du modèle basé sur les taux, une fois en faisant varier différentes

corrélations du transfert de masse, et une autre fois en combinant ces corrélations avec différents modèles cinétiques.

Dans le cadre de cette étude, les effets de cinq paramètres différents (modèle cinétique, facteur d'accélération, enthalpie d'absorption, diffusivité du CO₂ en solution aqueuse de la MEA et pression de vapeur) sur les performances de la colonne ont été étudiés en réalisant une étude paramétrique basée sur une approche étape-par-étape.

V.1. Aperçu général sur les paramètres du modèle étudiés dans ce travail

V.1.1. Modèle cinétique

Un grand nombre d'études expérimentales et théoriques ont été enregistrées dans la littérature sur la cinétique de la réaction entre le CO₂ et une solution aqueuse de MEA non chargée en CO₂ depuis les années 1950 (Pinsent et al., 1956; Danckwerts et Sharma, 1966; Hikita et al., 1977; Hikita et al, 1979; Blauwhoff et autres, 1983; Versteeg et autres, 1996; Horng et Li, 2002; Kucka et autres, 2002, 2003; Freguia et Rochelle, 2003; Jamal et autres, 2006; Kvamsdal et autres, 2009; Faramarzi, 2010; Plaza, 2011; Luo et autres, 2012; Ying et Eimer, 2013). Cependant, seuls quelques chercheurs ont étudié la cinétique de l'absorption du CO₂ dans des solutions aqueuse de MEA partiellement carbonatées (Littel et al., 1992; Aboudheir et al., 2003; Dang et Rochelle, 2003; Puxty et al., 2010; Dugas et Rochelle, 2011; Luo et al., 2015); parmi ces travaux de recherche, seuls deux modèles cinétiques intermoléculaires du dioxyde de carbone réagissant avec une solution aqueuse de MEA chargée ont été trouvés (Aboudheir et al., 2003 ; Luo et al., 2015). Le **tableau 21** comprend les deux modèles, le mécanisme sur lequel ils sont basés et leurs plages de validité.

Tableau 21. Résumé des modèles cinétiques

Référence	Type du mécanisme	Domaine de validité	Expression de la constante cinétique
Aboudheir et al. (2003)	Mécanisme intermoléculaire	3-9M 293-333K 0.1- 0.5 mole CO ₂ /mole MEA	$k_2 = \sum_i k_{2,i}[base, i]$ $k_2 = k_{2,MEA}[MEA] + k_{2,H_2O}[H_2O]$ $k_{2,MEA} = 4.61 * 10^9 \exp\left(\frac{-4412}{T_L}\right)$ $k_{2,H_2O} = 4.55 * 10^6 \exp\left(\frac{-3287}{T_L}\right)$
Luo et al. (2015)	Mécanisme intermoléculaire	1 and 5 M 298 to 343 K 0-0.4 mole CO ₂ / mole MEA	$k_2 = \sum_i k_{2,i}[base, i]$ $k_2 = k_{2,MEA}[MEA] + k_{2,H_2O}[H_2O]$ $k_{2,MEA} = 2.003 * 10^{10} \exp\left(\frac{-4742}{T_L}\right)$ $k_{2,H_2O} = 4.147 * 10^6 \exp\left(\frac{-3110}{T_L}\right)$

V.1.2. Facteur d'accélération

Depuis le siècle dernier, de nombreux chercheurs ont étudié le facteur d'accélération utilisé pour calculer les taux du transfert de matière des gaz vers les liquides (Hatta, 1928; Van Krevelen et Hoftijzer, 1948; Gilliland et al. 1952; Brian et al. 1961; Yeramian et al. 1970; Wellek et al, 1978; DeCoursey,1982; DeCoursey et Thring, 1989; Hikita et al., 1982; Van Wijngaarden et al., 1986; Versteeg et al., 1989; Van Swaaij et Versteeg, 1992; Hogendoorn et al., 1997; Last et Stichlmair, 2002; Cussler, 2009; Gaspar et Fosbøl, 2015). En conséquence, une grande variété de modèles ont été développés (Van Krevelen et Hoftijzer, 1948; Brian et al., 1961; Yeramian et al., 1970; Wellek et al., 1978; Last et Stichlmair, 2002; Cussler, 2009; Gaspar et Fosbøl, 2015). Une liste d'expressions permettant le calcul du facteur d'accélération est fournie dans le **tableau 22**.

Tableau 22. Résumé des modèles des facteurs d'accélération

Références	Expressions des facteurs d'accélération
Van Krevelen and Hoftijzer (1948)	$Ha = \frac{\sqrt{k_2 C_R D_{A,L}}}{k_{L,A}^0}$ $E_i^{film} = 1 + \left(\frac{C_R D_R}{v D_{A,L} C_{A,I}} \right)$ $E^{film} = \frac{Ha \sqrt{\frac{E_i^{film} - E^{film}}{E_i^{film} - 1}}}{\tanh \left(Ha \sqrt{\frac{E_i^{film} - E^{film}}{E_i^{film} - 1}} \right)}$
Brian et al. (1961)	$E_i^{pen} = \sqrt{\frac{D_{A,L}}{D_R}} + \sqrt{\frac{D_R}{D_{A,L}} \left(\frac{C_R}{v C_{A,I}} \right)}$ $E^{pen} = \frac{Ha \sqrt{1 - \left(\frac{E^{pen} - 1}{E_i^{pen} - 1} \right)}}{\tanh \left(Ha \sqrt{1 - \left(\frac{E^{pen} - 1}{E_i^{pen} - 1} \right)} \right)}$

$$E_1^{\text{pen}} = \text{Ha} \left[\left\{ 1 + \frac{\pi}{8\text{Ha}^2} \right\} \text{erf} \left[\sqrt{\frac{4\text{Ha}^2}{\pi}} \right] + \frac{1}{2\text{Ha}} \exp \left(\frac{-4\text{Ha}^2}{\pi} \right) \right]$$

$$E_i^{\text{pen}} = 1 + \left(\frac{C_R}{\nu C_{A,I}} \right)$$

$$E^{\text{pen}} = \frac{(E_1^{\text{pen}})^2}{2(E_i^{\text{pen}} - 1)} \left[\sqrt{1 + \frac{4(E_i^{\text{pen}} - 1)E_i^{\text{pen}}}{(E_1^{\text{pen}})^2} - 1} \right]$$

$$E^{\text{surf}} = \frac{\text{Ha}^2}{2(E_i^{\text{pen}} - 1)} \left[\sqrt{1 + \frac{4[(E_i^{\text{pen}} - 1)^2 + E_i^{\text{pen}}\text{Ha}^2(E_i^{\text{pen}} - 1)]}{\text{Ha}^4} - 1} \right]$$

$$E_1^{\text{film}} = \frac{(\text{Ha})}{\tanh(\text{Ha})}$$

$$E_i^{\text{film}} = 1 + \left(\frac{C_R D_R}{\nu D_{A,L} C_{A,I}} \right)$$

$$E^{\text{film}} = 1 + \frac{1}{[(1/(E_i - 1))^{1.35} + (1/(E_1 - 1))^{1.35}]^{1/1.35}}$$

$$E^{\text{surf}} = \frac{1}{\left\{ [1 - 1/E_i^{\text{film}}] / \text{Ha}^{3/2} + [1/(E_i^{\text{film}})^{3/2}] \right\}^{2/3}}$$

$$E^{\text{film}} = (\text{Ha}) \coth(\text{Ha})$$

$$E_i^{\text{film}} = 1 + \left(\frac{C_R D_R}{\nu D_{A,L} C_{A,I}} \right)$$

$$(1 - E_i^{\text{film}})Y^2 + \text{Ha}(y_{A,I} - 1)Y + E_i^{\text{film}} - y_A = 0$$

$$Y = \sqrt{y_R^i}$$

$$E^{\text{film}} = \text{Ha} \sqrt{y_R^i} \frac{1 - y_{A,I}}{1 - y_A}$$

V.1.3. Enthalpie d'absorption

Bien que la MEA soit considérée comme le solvant le plus couramment utilisé pour l'élimination du CO₂, seules des données limitées sur les mesures directes de la chaleur d'absorption de la réaction entre le CO₂ et les solutions aqueuses de MEA ont été publiées (Mathonat et al., 1998; Carson et al., 2000; Kim et Svendsen, 2007; Kim, 2009; Arcis et al., 2011).

Peu de chercheurs, dans leurs travaux, ont utilisé des valeurs fixes pour la prévision de l'enthalpie d'absorption (Pandya, 1983; Kohl et Nielsen, 1997; Kvamsdal et Rochelle, 2008); cependant, d'autres ont développé des nouvelles corrélations pour calculer l'enthalpie d'absorption sur la base des données empiriques existantes disponibles dans la littérature (Kim, 2009; Llano-Restrepo et Araujo-Lopez, 2015). Toutes ces corrélations et ces valeurs fixes pour l'estimation de l'enthalpie d'absorption sont résumées dans le **tableau 23**.

Tableau 23. Résumé des corrélations de l'enthalpie d'absorption et des valeurs fixes

Références	Corrélations de l'enthalpie d'absorption et des valeurs fixes
Kohl and Nielsen (1997)	(118.2 kJ/mol)
Pandya (1983)	(84.4 kJ/mol)
Kim (2009)	$-\Delta H_{rx}^{(abs)} = 84.68 - 0.1135t_L + 0.0027t_L^2$ $t_L = T_L - 273.15$
Llano-Restrepo and Araujo-Lopez (2015) basée sur les données de Kim and Svendsen (2007)	$-\Delta H_{rx}^{(abs)} = 85.2903 - 38.5592\alpha_{CO_2} + 193.189(\alpha_{CO_2})^2 - 317.759(\alpha_{CO_2})^3 + 124.958(\alpha_{CO_2})^4$
Llano-Restrepo and Araujo-Lopez (2015) basée sur les données d'Arcis et al. (2011)	$-\Delta H_{rx}^{(abs)} = B_0 + B_1\alpha_{CO_2} + B_2(\alpha_{CO_2})^2 + B_3(\alpha_{CO_2})^3$ <p>Avec:</p> $B_0 = 111.171 - 4.62336 P + 0.0772299P^2$ $B_1 = -4.33417 + 12.6306 P - 0.222593P^2$ $B_2 = -72.9602 - 13.3031 P + 0.244333P^2$ $B_3 = 3.72612 + 7.62998 P - 0.135737P^2$

V.1.4. Pression de vapeur

Au fil des ans, diverses équations dépendantes de la température pour l'estimation de la pression de vapeur d'eau ont été développées ; dans cette étude, nous considérerons celles qui sont les plus couramment utilisées dans la littérature (Antoine, 1888; Riedel, 1954; Ambrose et Walton, 1989). Ces corrélations sont écrites dans le **tableau 24**.

Tableau 24. Résumé des corrélations de la pression de vapeur

Références	Corrélations
Antoine (1888)	$P_S^{sat} = 10^5 * 10^{\left[5.11564 - \frac{1687.537}{T_G + 230.17 - 273.15}\right]}$
Riedel (1954)	$P_S^{sat} = 10^5 * \exp \left[\left(A^+ + \frac{B^+}{T_r} + C^+ \ln T_r + D^+ T_r^6 \right) + \ln P_c \right]$ $A^+ = -35Q$ $B^+ = -36Q$ $C^+ = 42Q + \alpha_c$ $D^+ = -Q$ $K \text{ to be } 0.0838$ $Q = K(3.758 - \alpha_c)$ $\alpha_c = \frac{3.758K\psi_b + \ln(P_c/1.01325)}{K\psi_b - \ln T_{br}}$ $\psi_b = -35 + \frac{36}{T_{br}} + 42 \ln T_{br} - T_{br}^6$
Wagner (1973,1977)	P_S^{sat} $= 10^5$ $* \exp \left[(-7.77224(1 - T_r) + 1.45684(1 - T_r)^{1.5} - 2.71942(1 - T_r)^3 - 1.41336(1 - T_r)^6 / T_r + \ln P_c \right]$
Ambrose and Walton (1989)	$P_S^{sat} = 10^5 * \exp \left[(f^{(0)} + \omega f^{(1)} + \omega^2 f^{(2)}) + \ln P_c \right]$ $f^{(0)} = \frac{-5.97616(1 - T_r) + 1.29874(1 - T_r)^{1.5} - 0.60394(1 - T_r)^{2.5} - 1.06841(1 - T_r)^5}{T_r}$ $f^{(1)} = \frac{-5.03365(1 - T_r) + 1.11505(1 - T_r)^{1.5} - 5.41217(1 - T_r)^{2.5} - 7.46628(1 - T_r)^5}{T_r}$ $f^{(2)} = \frac{-0.64771(1 - T_r) + 2.41539(1 - T_r)^{1.5} - 4.26979(1 - T_r)^{2.5} + 3.25259(1 - T_r)^5}{T_r}$

V.1.5. Diffusivité du CO₂ dans les solutions aqueuses de MEA

En raison de la réaction qui se produit entre le CO₂ et les solutions d'amines, la diffusivité du CO₂ dans la solution de MEA ne peut pas être déterminée directement. C'est pourquoi Clarke (1964) a proposé la méthode de l'analogie avec le N₂O. Cette approche peut être exprimée comme suit :

$$D_{CO_2,L} = D_{N_2O,L} \left(\frac{D_{CO_2}^\circ}{D_{N_2O}^\circ} \right) \quad (25)$$

Diverses mesures ont été rapportées dans la littérature sur la diffusivité du N₂O dans les solutions aqueuses de MEA sur une large intervalle de concentration et de température de MEA (Clarke, 1964; Cullen et Davidson, 1957; Sada et al., 1978; Li et Lai, 1995; Ko et al., 2001; Jamel, 2002; Ying et Eimer, 2012); sur la base de ces données expérimentales, différentes corrélations ont été établies qui sont énumérés dans le **tableau 25**.

Tableau 25. Liste des corrélations de la diffusivité du CO₂ dans une solution aqueuse de MEA

Références	Corrélations de la diffusivité du CO ₂
Ko et al. (2001)	$D_{N_2O}^\circ = 5.07 * 10^{-6} \exp\left(\frac{-2371}{T_L}\right)$ $D_{CO_2}^\circ = 2.35 * 10^{-6} \exp\left(\frac{-2119}{T_L}\right)$ $D_{N_2O,L} = (5.07 * 10^{-6} + 8.65 * 10^{-7} C_{MEA} + 2.78 * 10^{-7} C_{MEA}^2) * \exp\left[\frac{-2371 - 9.34 * 10^1 C_{MEA}}{T_L}\right]$ $D_{CO_2,L} = D_{N_2O,L} \left(\frac{D_{CO_2}^\circ}{D_{N_2O}^\circ} \right)$
Jamel (2002)	$D_{N_2O}^\circ = 5.2457 * 10^{-6} \exp\left(\frac{-2388.9}{T_L}\right)$ $D_{CO_2}^\circ = 3.7191 * 10^{-6} \exp\left(\frac{-2257.9}{T_L}\right)$ $D_{N_2O,L} = (5.2457 * 10^{-6} + A_1 * w_{MEA} + A_2 w_{MEA}^2) * \exp\left[\frac{(-2388.9)}{T_L}\right]$ $A_1 = 1.4196 * 10^{-5} - \frac{4.4209 * 10^{-3}}{T_L}$ $A_2 = -3.2060 * 10^{-6} - \frac{9.8151 * 10^{-4}}{T_L}$ $D_{CO_2,L} = D_{N_2O,L} \left(\frac{D_{CO_2}^\circ}{D_{N_2O}^\circ} \right)$
Ying and Eimer (2012)	$D_{N_2O}^\circ = 5.07 * 10^{-6} \exp\left(\frac{-2371}{T_L}\right)$ $D_{CO_2}^\circ = 2.35 * 10^{-6} \exp\left(\frac{-2119}{T_L}\right)$ $D_{N_2O,L} = (5.07 * 10^{-6} - 3.5443 * 10^{-7} C_{MEA} + 3.4294 * 10^{-9} C_{MEA}^2) * \exp\left[\frac{(-2371 + 0.3749 * C_{MEA})}{T_L}\right]$ $D_{CO_2,L} = D_{N_2O,L} \left(\frac{D_{CO_2}^\circ}{D_{N_2O}^\circ} \right)$

V.2. Méthodologie

Les effets du changement des corrélations empiriques ou des valeurs fixes sur les performances de la colonne (les profils de la température et de la charge du CO₂ en phase liquide) ont été étudiés pour chaque paramètre du modèle en suivant une approche étape-par-étape; cela signifie que chaque fois la meilleure corrélation pour le calcul du paramètre X est déterminée puis utilisée (ou fixée) pour étudier le paramètre suivant, et ainsi de suite. Pour une meilleure compréhension, le **tableau 26** montre les différentes méthodes utilisées pour le calcul des paramètres du modèle dans chaque cas.

Tableau 26. Résumé des corrélations utilisées pour le calcul des paramètres du modèle dans chaque cas.

	Modèle cinétique	Facteur d'accélération	Enthalpie d'absorption	Pression de vapeur	Diffusivité du CO ₂	Nombre du cas
1. Modèle cinétique	Variable a. Luo et al. (2015) b. Aboudheir et al. (2003)	Fixe Gaspar et Fosbøl (2015)	Fixe Llano-Restrepo et Araujo-Lopez (2015) sur base des données d'Arcis et al. (2011)	Fixe Antoine (1888)	Fixe Ying et Eimer (2012)	2 cas
2. Facteur d'accélération	Fixe Luo et al. (2015)	Variable a. Van Krevelen et Hoftijzer (1948) b. Brian et al. (1961) c. Yeramian et al. (1970) basé sur la théorie de pénétration d. Yeramian et al. (1970) basé sur la théorie des surfaces renouvelables e. Wellek et al. (1978) f. Last et Stichlmair (2002) g. Cussler et al. (2009) h. Gaspar et Fosbøl (2015)	Fixe Llano-Restrepo et Araujo-Lopez (2015) sur base des données d'Arcis et al. (2011)	Fixe Antoine (1888)	Fixe Ying et Eimer (2012)	8 cas

3. Enthalpie d'absorption	Fixe Luo et al. (2015)	Fixe Van Krevelen et Hoftijzer (1948)	Variable a. Kohl et Nielsen (1997) b. Pandya (1983) c. Kim (2009) d. Llano-Restrepo et Araujo-Lopez (2015) sur la base des données de Kim et Svendsen (2007) e. Llano-Restrepo et Araujo-Lopez (2015) sur base des données d'Arcis et al. (2011)	Fixe Antoine (1888)	Fixe Ying et Eimer (2012)	5 cas
4. Pression de vapeur	Fixe Luo et al. (2015)	Fixe Van Krevelen et Hoftijzer (1948)	Fixe Llano-Restrepo et Araujo-Lopez (2015) sur base des données d'Arcis et al. (2011)	Variable a. Antoine (1888) b. Riedel (1954) c. Ambrose et Walton (1989)	Fixe Ying et Eimer (2012)	3 cas
5. Diffusivité du CO₂	Fixe Luo et al. (2015)	Fixe Van Krevelen et Hoftijzer (1948)	Fixe Llano-Restrepo et Araujo-Lopez (2015) sur base des données d'Arcis et al. (2011)	Fixe Antoine (1888)	Variable a. Ko et al. (2001) b. Jamel (2002) c. Ying et Eimer (2012)	3 cas

V.3. Résultats et discussion

Dans ce travail de recherche, la simulation du modèle était basée sur les données expérimentales rapportées dans la littérature par [Sonderby et al. \(2013\)](#) en utilisant une colonne d'absorption du CO₂ à l'échelle pilote ; où 23 expériences ont été réalisées, désignées (R1 à R23); cependant, dans cette étude, seules 9 expériences (R 3, 8, 13-15, 18, 21-23) ont été prises en compte, comme le montre le **tableau 27**. Cette sélection a été fondée sur deux critères : une faible erreur expérimentale et un grand nombre de points (mesures) dans chaque expérience.

Tous les résultats de la simulation, présentés en termes du pourcentage d'écart relatif moyen de la charge du CO₂ et de la température en phase liquide pour toutes les expériences (R 3, 8, 13-15, 18, 21-23) et tous les cas (21 cas), sont résumés dans le **tableau 27**.

Tableau 27. Résultats de la simulation pour les essais (R 3, 8, 13-15, 18, 21-23) de Sonderby et al. (2013)

1. Modèle cinétique		R 3	R 8	R 13	R 14	R 15	R 18	R 21	R 22	R 23
ERM% pour le profil de la charge du CO ₂ en phase liquide	Cas 1.a	3,719	3,373	5,074	5,146	5,188	2,101	2,099	1,552	1,804
	Cas 1.b	3,920	4,874	6,291	5,444	6,391	6,556	2,626	2,668	3,568
ERM% pour le profil de la température du liquide	Cas 1.a	2,015	4,278	2,686	2,738	1,823	5,091	2,532	2,530	2,593
	Cas 1.b	3,789	6,580	2,910	3,703	2,781	6,442	3,229	4,088	3,643
2. Facteur d'accélération		R 3	R 8	R 13	R 14	R 15	R 18	R 21	R 22	R 23
ERM% pour le profil de la charge du CO ₂ en phase liquide	Cas 2.a	3,709	3,359	5,055	5,144	5,174	2,055	2,095	1,550	1,762
	Cas 2.b	3,764	3,412	5,111	5,154	5,220	2,213	2,102	1,559	1,833
	Cas 2.c	3,736	3,459	5,135	5,170	5,256	2,334	2,101	1,565	1,867
	Cas 2.d	3,735	3,461	5,155	5,171	5,258	2,340	2,100	1,565	1,870
	Cas 2.e	3,728	3,467	5,152	5,166	5,260	2,350	2,100	1,563	1,867
	Cas 2.f	3,733	3,491	5,189	5,191	5,285	2,417	2,100	1,571	1,891
	Cas 2.g	3,800	3,595	5,284	5,232	5,361	2,688	2,103	1,600	1,961
	Cas 2.h	3,719	3,373	5,074	5,146	5,188	2,101	2,099	1,552	1,804
ERM% pour le profil de la température du liquide	Cas 2.a	2,008	4,260	2,664	2,734	1,814	5,078	2,522	2,521	2,583
	Cas 2.b	2,038	4,330	2,744	2,743	1,844	5,125	2,554	2,550	2,610
	Cas 2.c	2,061	4,385	2,727	2,749	1,867	5,160	2,579	2,573	2,630
	Cas 2.d	2,063	4,387	2,726	2,750	1,868	5,162	2,581	2,574	2,632

	Cas 2.e	2,068	4,396	2,716	2,749	1,869	5,164	2,578	2,569	2,625
	Cas 2.f	2,073	4,418	2,720	2,756	1,885	5,183	2,603	2,594	2,650
	Cas 2.g	2,127	4,540	2,762	2,783	1,934	5,263	2,654	2,642	2,695
	Cas 2.h	2,015	4,278	2,686	2,738	1,823	5,091	2,532	2,530	2,593
3. Enthalpie d'absorption		R 3	R 8	R 13	R 14	R 15	R 18	R 21	R 22	R 23
ERM% pour le profil de la charge du CO ₂ en phase liquide	Cas 3.a	3,858	3,456	5,153	5,486	5,188	2,286	2,099	1,587	1,767
	Cas 3.b	4,394	3,462	5,231	5,565	5,256	2,655	2,158	1,605	1,772
	Cas 3.c	4,406	3,464	5,235	5,593	5,259	2,648	2,159	1,606	1,773
	Cas 3.d	4,439	3,469	5,244	5,615	5,262	2,666	2,160	1,608	1,782
	Cas 3.e	3,709	3,359	5,055	5,144	5,174	2,055	2,095	1,550	1,762
ERM% pour le profil de la température du liquide	Cas 3.a	7,478	6,220	4,871	4,979	4,131	5,190	5,573	5,746	5,239
	Cas 3.b	8,961	6,425	9,382	8,889	6,565	5,703	7,793	5,881	5,416
	Cas 3.c	9,151	6,603	9,543	9,018	6,763	5,805	7,925	5,944	5,415
	Cas 3.d	9,600	7,006	9,916	9,384	6,968	6,091	8,114	6,118	5,623
	Cas 3.e	2,008	4,260	2,664	2,734	1,814	5,078	2,522	2,521	2,583
4. Pression de vapeur		R 3	R 8	R 13	R 14	R 15	R 18	R 21	R 22	R 23
ERM% pour le profil de la charge du CO ₂ en phase liquide	Cas 4.a	3,709	3,359	5,055	5,144	5,174	2,055	2,095	1,550	1,762
	Cas 4.b	9,361	6,438	7,141	5,794	5,201	3,237	3,839	2,813	3,567
	Cas 4.c	3,888	4,825	5,984	5,492	5,199	3,074	2,370	2,003	3,146
ERM% pour le profil de la température du liquide	Cas 4.a	2,008	4,260	2,664	2,734	1,814	5,078	2,522	2,521	2,583
	Cas 4.b	15,078	11,868	17,137	17,035	9,689	12,278	18,383	17,308	18,346
	Cas 4.c	7,634	9,843	5,712	6,536	4,125	8,212	5,423	6,963	6,908
5. Diffusivité du CO₂		R 3	R 8	R 13	R 14	R 15	R 18	R 21	R 22	R 23
ERM% pour le profil de la charge du CO ₂ en phase liquide	Cas 5.a	3,732	3,516	5,229	5,221	5,252	2,421	2,098	1,591	1,964
	Cas 5.b	3,828	5,150	6,107	5,378	6,191	5,961	2,554	2,578	2,884
	Cas 5.c	3,709	3,359	5,055	5,144	5,174	2,055	2,095	1,550	1,762
ERM% pour le profil de la température du liquide	Cas 5.a	2,085	4,438	2,739	2,765	1,861	5,178	2,628	2,621	2,673
	Cas 5.b	3,567	6,305	2,928	3,516	2,571	6,254	3,115	3,662	3,521
	Cas 5.c	2,008	4,260	2,664	2,734	1,814	5,078	2,522	2,521	2,583

Dans cette section, les résultats présentés dans le **tableau 27** sont discutés en termes généraux; c'est-à-dire, ils seront examinés seulement par rapport à l'écart de la simulation

entre les différents essais; puis une discussion détaillée est donnée pour chaque paramètre séparément (dans les sections V.3.1- V.3.5).

Le **Cas 5.c** est choisi comme cas de base pour cette discussion parce qu'il représente une combinaison entre les corrélations qui fournissent le plus faible ERM%. En outre, il a été remarqué que pour la charge du CO₂ en phase liquide, les ERM% des différents essais se situent entre 1 et 6%. On obtient un ERM% maximal de ± 5 % pour les essais (R 13-15), tandis qu'un ERM% minimal de ± 2 % est obtenu pour les essais (R 18, 21-23). D'autre part, pour la température du liquide, les ERM% varient également entre 1 et 6 %. Un ERM% maximal de ± 5 % est obtenu pour l'essai R 18, un ERM% de 4,260 % est donné par l'essai R 8, tandis que les autres essais (R 3, 13-15, 21-23) ont un ERM% de ± 2 %.

Cette différence des ERM% entre les essais peut être due aux erreurs expérimentales qui varient d'un essai à l'autre. Ces écarts peuvent être causés par plusieurs raisons, notamment l'utilisation d'instruments manuels au lieu d'affichages numériques qui nécessitent un étalonnage avant chaque essai, la difficulté d'atteindre les conditions adiabatiques à l'échelle pilote, ce qui a été supposé dans le développement du modèle et enfin, les pertes de pression et de chaleur le long de la colonne.

V.3.1. Modèle cinétique

Une sélection judicieuse du modèle cinétique est importante pour obtenir des prévisions précises. Par conséquent, la température et la charge du CO₂ en phase liquide ont été simulées à l'aide de deux modèles cinétiques différents (Aboudheir et al., 2003 ; Luo et al., 2015).

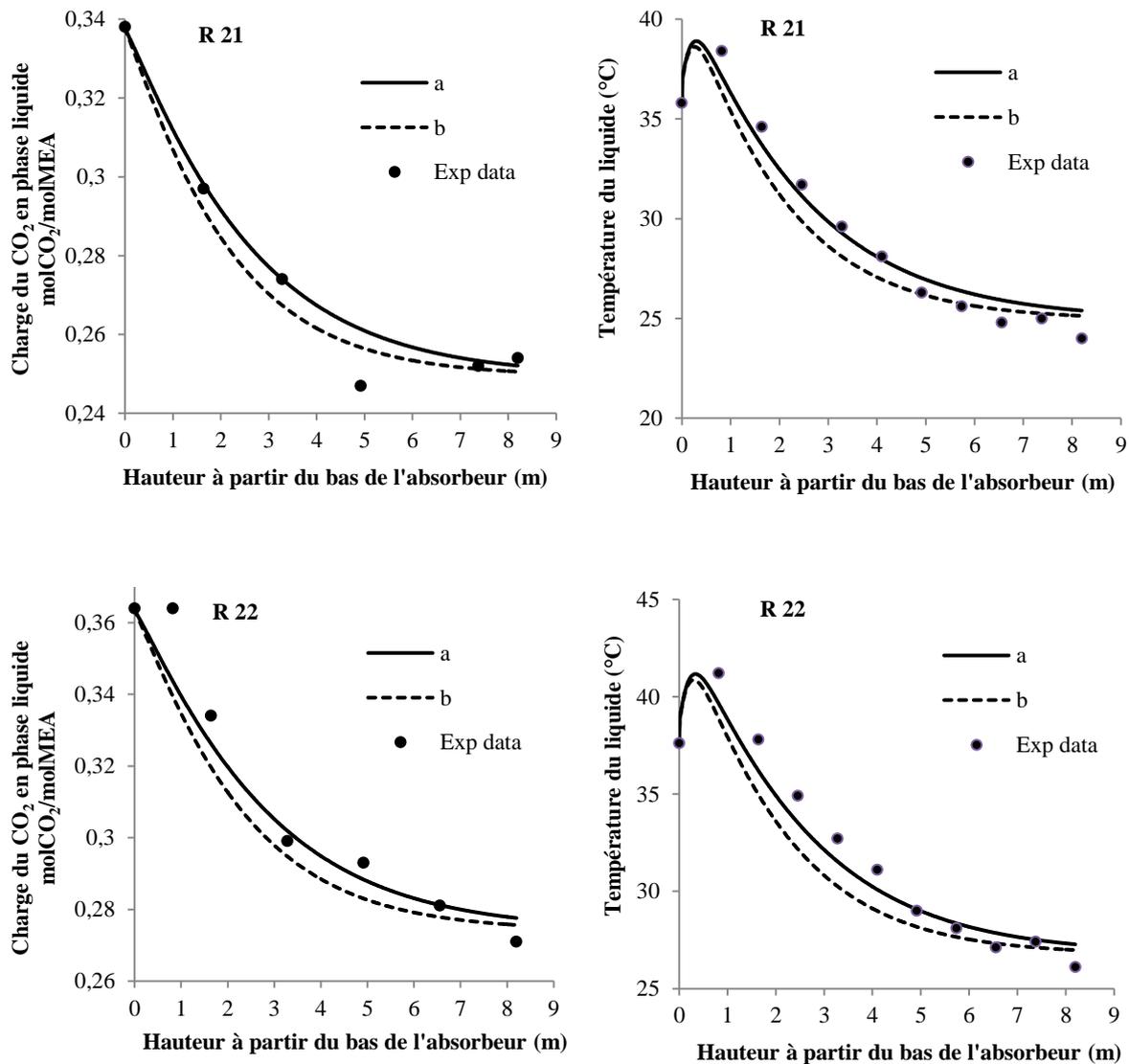


Figure 23. Résultats de la simulation obtenus à l'aide de différents modèles cinétiques : (a) Luo et al. (2015) et (b) Aboudheir et al. (2003)

La **figure 23** illustre les résultats de la simulation comparés aux valeurs empiriques obtenues à partir des essais R 21 et R 22 de Sonderby et al. (2013). Selon cette figure, les profils de la température et de la charge du CO₂ en phase liquide simulés en utilisant le modèle cinétique suggéré par Luo et al. (2015) sont plus précis que ceux obtenus en utilisant le modèle cinétique d'Aboudheir et al. (2003). L'utilisation du modèle cinétique d'Aboudheir et al. (2003) sous-estime légèrement la température et la charge du CO₂ en phase liquide; cette faible précision présentée par ce modèle cinétique pourrait être affectée par les méthodes instrumentales employées pour obtenir les données cinétiques, et les corrélations empiriques des propriétés physiques (la diffusivité et la solubilité du CO₂ dans les solutions aqueuses) employées pour le développement du modèle cinétique. De plus, il a aussi été observé que le

modèle cinétique a une grande influence sur la charge du CO₂ et la température en phase liquide. Et d'après les résultats du cas 1.a-1.b présentés dans le **tableau 27**, les mêmes conclusions se retrouvent pour les autres essais.

V.3.2. Facteur d'accélération

Sur la base des résultats présentés dans le **tableau 27** pour les cas 2.a-2.h, on peut déduire que l'effet des différents modèles du facteur d'accélération sur les performances de l'absorbeur n'est pas très significatif. Les ERM% entre les résultats de la simulation et les données mesurées sont très proches pour tous les cas, la différence est de l'ordre de $\pm 0,1\%$ pour la température et la charge du CO₂ en phase liquide. Le plus faible ERM% est obtenu en utilisant le modèle développé par [Van Krevelen et Hoftijzer \(1948\)](#), tandis que l'ERM% le plus élevé est donné par le modèle suggéré par [Cussler et al. \(2009\)](#).

V.3.3. Enthalpie d'absorption

Les profils simulés de la température et de la charge du CO₂ en phase liquide ont été comparés aux mesures prises des essais R 21 et R 22 de [Sonderby et al. \(2013\)](#), comme le montre la **figure 24**, afin d'étudier l'effet de l'enthalpie d'absorption sur les performances de l'absorbeur.

On remarque que l'influence de l'enthalpie d'absorption sur la charge du CO₂ en phase liquide est très faible, les différents profils obtenus pour le R 21 et le R 22 étant quasi similaires, il y a juste une légère différence dans les 3 derniers mètres de la hauteur de l'absorbeur, où le plus faible ERM% est obtenu à partir de la corrélation de [Llano-Restrepo et Araujo-Lopez \(2015\)](#) sur la base des données d'[Arcis et al. \(2011\)](#). D'autre part, l'effet est très élevé pour les profils de la température du liquide; il a été observé que l'utilisation de la valeur fixe de 118,2 kJ/mol donnée par [Kohl et Nielsen \(1997\)](#) sous-estime les profils de la température du liquide dans les deux essais R 21 et R 22 avec des ERM% de 5,573% et 5,746%, respectivement. De plus, les profils de la température du liquide obtenus en utilisant la valeur fixe de 84,4 kJ/mol donnée par [Pandya \(1983\)](#) et les deux corrélations développées par [Kim \(2009\)](#) et [Llano-Restrepo et Araujo-Lopez \(2015\)](#) sur la base des données de [Kim et Svendsen \(2007\)](#) sont presque superposées avec des ERM% de 7,793, 7,925 et 8,114 %, respectivement, pour le R 21; et des ERM% de 5,881, 5,944 et 6,118 %, respectivement, pour le R 22; ils montrent un bon accord avec les données expérimentales dans les 3 premiers mètres puis ils sur-prévoient la température du liquide pour le reste de la colonne. Enfin, la

corrélation suggérée par Llano-Restrepo et Araujo-Lopez (2015) sur la base des données d'Arcis et al. (2011), fournit le plus faible ERM% de 2,522 % et 2,521 %, correspondant respectivement au R 21 et au R 22; dans ce cas, l'accord global entre le profil de la température du liquide simulé et les mesures est généralement bon.

D'après les résultats du **tableau 27**, plus précisément les cas 3.a-3.e pour tous les essais, il a été constaté qu'il mène aux mêmes conclusions trouvées pour le R 21 et R 22.

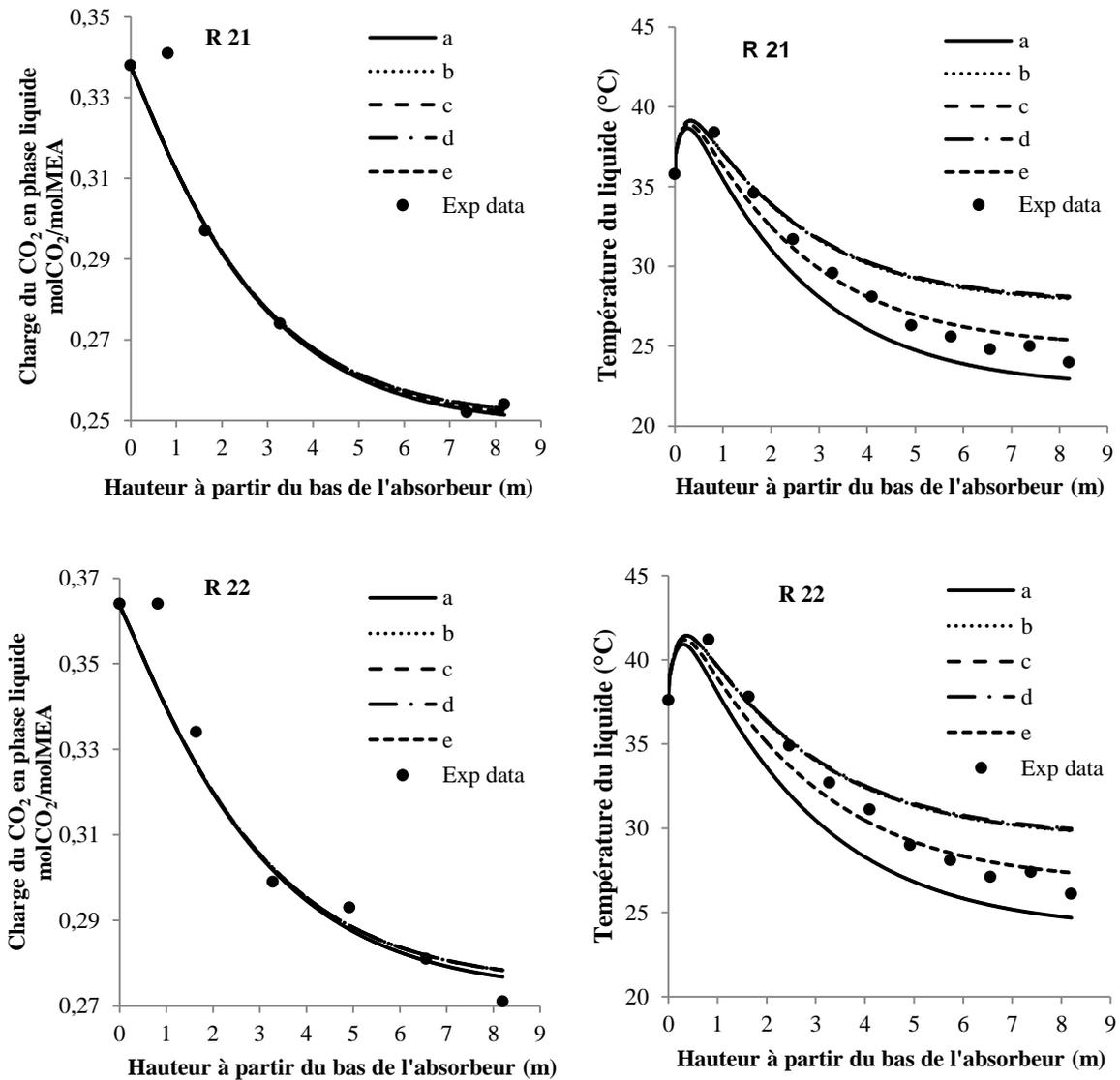


Figure 24. Résultats de la simulation obtenus en utilisant différentes approches de l'enthalpie d'absorption : (a) Kohl et Nielsen (1997), (b) Pandya (1983), (c) Kim (2009), (d) Llano-Restrepo et Araujo-Lopez (2015) sur la base des données de Kim et Svendsen (2007), et (e) Llano-Restrepo et Araujo-Lopez (2015) sur la base des données d'Arcis et al. (2011)

V.3.4. Pression de vapeur

Différentes corrélations pour l'estimation de la pression de vapeur ont été utilisées pour simuler la température et la charge de CO₂ en phase liquide en utilisant les données expérimentales de [Sonderby et al. \(2013\)](#), les résultats pour R 21 et R 22 sont illustrés dans la **figure 25**.

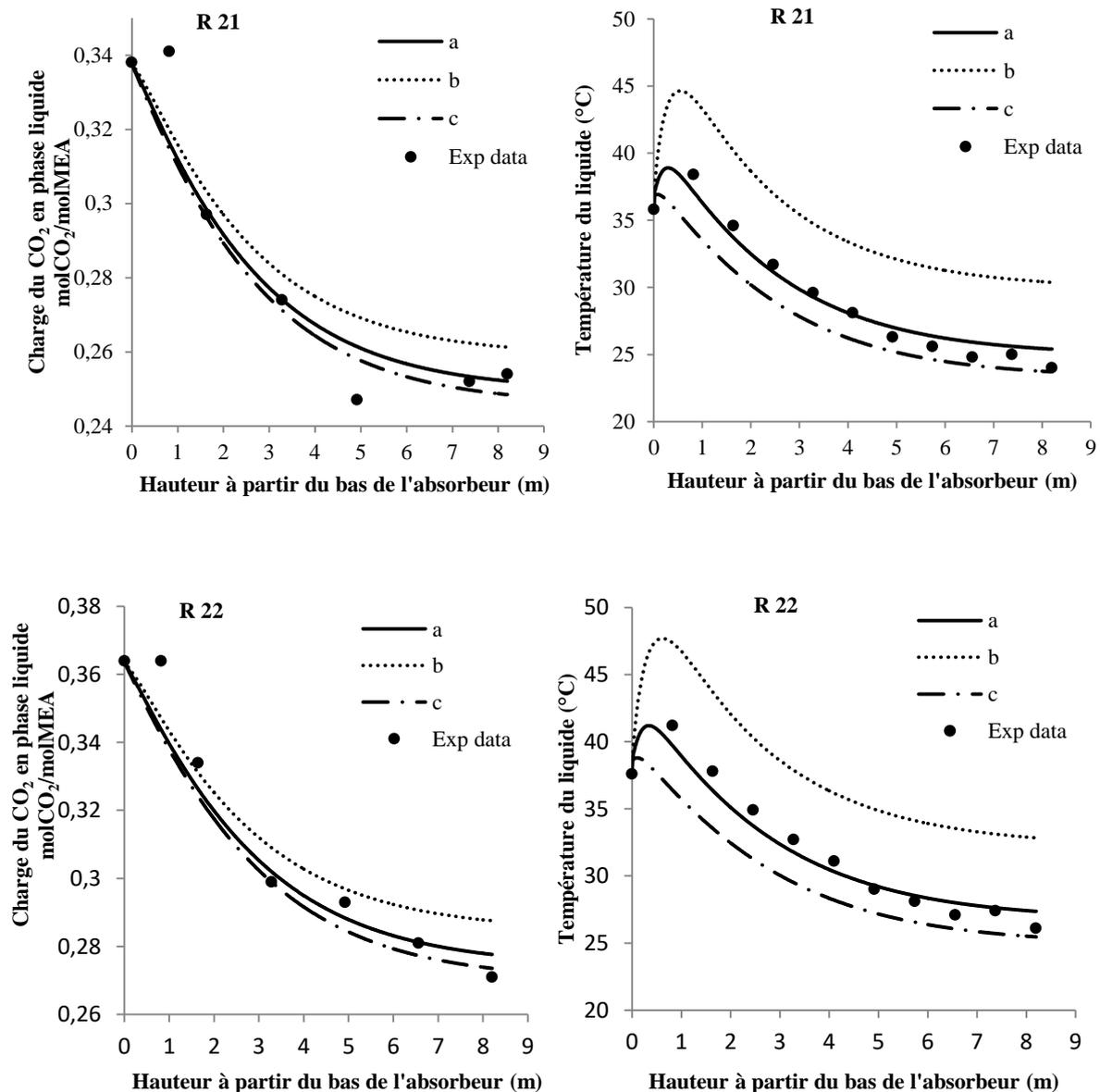


Figure 25. Résultats de la simulation obtenus en employant différents corrélations de la pression de vapeur : (a) *Antoine (1888)*, (b) *Riedel (1954)*, et (c) *Ambrose et Walton (1989)*

Comme le montre la **figure 25**, l'influence de la pression de vapeur sur la température et la charge du CO₂ en phase liquide est importante. D'après les essais R 21 et R 22, les résultats

obtenus en utilisant la corrélation développée par [Antoine \(1888\)](#) montrent un bon accord avec les données expérimentales; contrairement à la corrélation suggérée par [Riedel \(1954\)](#) où l'ERM% est très important (voir le **tableau 27**), elle sur-estime beaucoup la température et la charge du CO₂ en phase liquide; tandis que l'utilisation de la corrélation d'[Ambrose et Walton \(1989\)](#) les sous-estime. Dans l'ensemble, et selon ces résultats ainsi que les résultats présentés dans le **tableau 27** pour les cas 4.a-4.d, il a été conclu que la corrélation développée par [Antoine \(1888\)](#) conduit aux résultats de simulation les plus précis.

V.3.5. Diffusivité du CO₂ dans les solutions aqueuses de MEA

L'influence de la diffusivité du CO₂ dans les solutions aqueuses de MEA sur les performances de la colonne d'absorption est étudiée à l'aide des mesures prises par [Sonderby et al. \(2013\)](#). Les résultats, illustrés dans la **figure 26**, sont présentés en termes de température et de la charge du CO₂ en phase liquide.

Selon cette figure, on a remarqué que l'influence de la diffusivité du CO₂ en solution aqueuse de MEA sur les performances de l'absorbeur n'est pas très importante; les trois corrélations montrent un bon accord avec les données expérimentales; les profils obtenus à partir des corrélations de [Ko et al. \(2001\)](#) et de [Ying et Eimer \(2012\)](#) se chevauchent presque avec des ERMs% très proches (voir le **tableau 27**); cependant, l'utilisation de la corrélation de [Jamel \(2002\)](#) sous-prédit à la fois la température et la charge du CO₂ en phase liquide. Le plus faible ERM% est obtenu à partir de la corrélation suggérée par [Ying et Eimer \(2012\)](#), tandis que l'ERM% le plus élevé est donné par la corrélation développée par [Jamel \(2002\)](#); et selon le **tableau 27** pour les cas 5.a-5.c, la même chose est observée pour les autres essais.

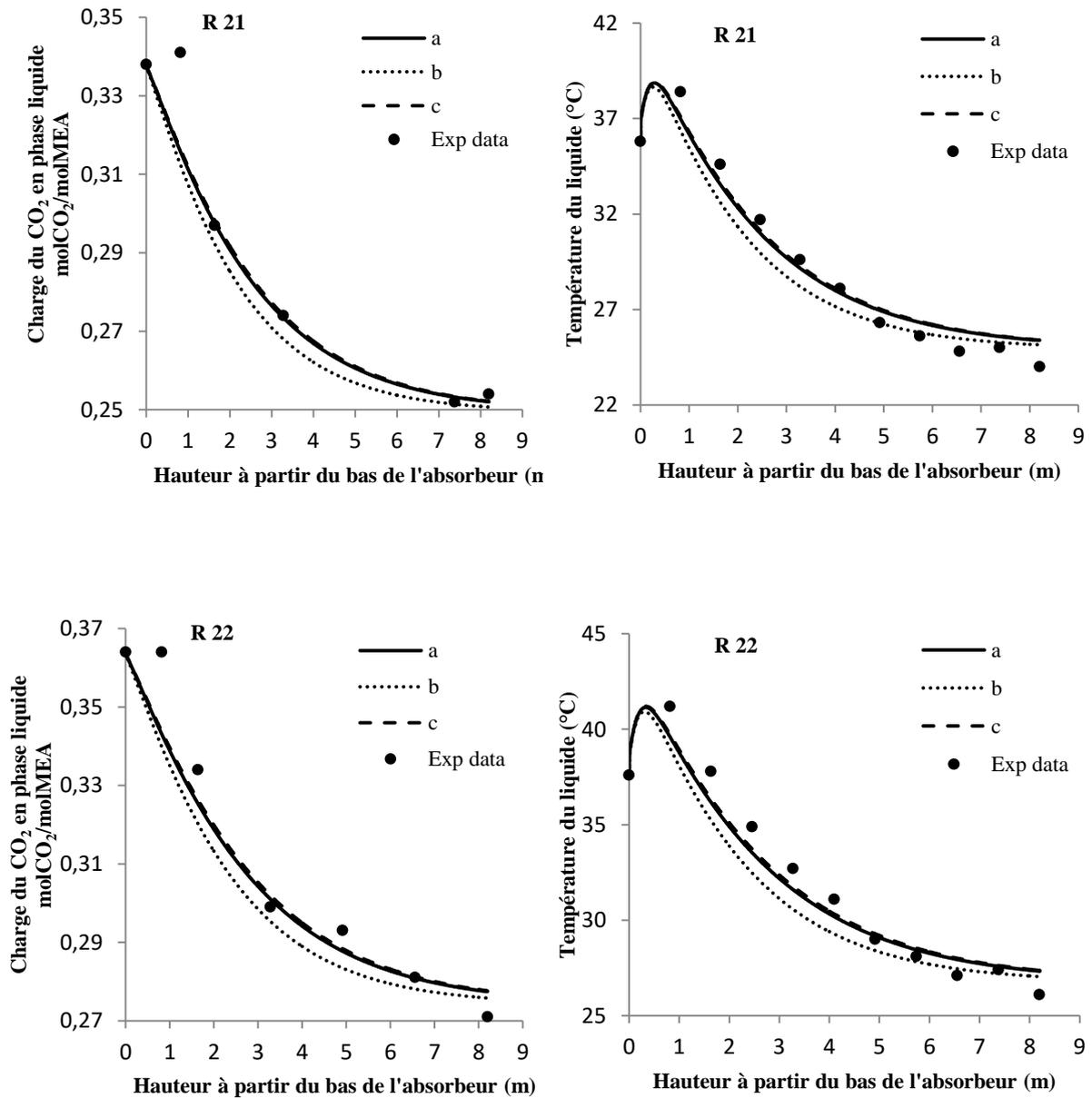


Figure 26. Résultats de la simulation obtenus en utilisant différentes corrélations pour le calcul de la diffusivité du CO₂ en solution aqueuse de MEA : (a) Ko et al. (2001), (b) Jamel (2002) et (d) Ying et Eimer (2012)

V.4. Valeur ajoutée de cette étude à la modélisation et à la simulation

En général, les techniques expérimentales, le nombre des mesures, ainsi que les hypothèses qui se cachent derrière les différentes corrélations des paramètres du modèle sont la principale raison des écarts entre les données expérimentales et les profils simulés; par conséquent, une bonne sélection de ces corrélations est d'une grande importance, ce qui est l'objectif clé de cette étude paramétrique. Et afin de prouver son importance pour l'obtention des résultats de modélisation et de simulation fiables, une comparaison entre deux combinaisons de différents paramètres du modèle qui présentent le plus haut et le plus faible ERM% a été effectuée (seuls ces deux cas ont été choisis car le nombre de combinaisons possibles est très important); en d'autres termes, la différence d'écart entre le pire et le meilleur cas est étudiée dans cette section, le **tableau 28** résume les corrélations des paramètres du modèle utilisés dans chaque cas.

Tableau 28. Liste des corrélations des paramètres du modèle utilisés dans chaque cas

Paramètres	Cas 1	Cas 2
Le modèle cinétique	Aboudheir et al. (2003)	Luo et al. (2015)
Le facteur d'accélération	Cussler et al. (2009)	Van Krevelen et Hoftijzer (1948)
L'enthalpie d'absorption	Llano-Restrepo et Araujo-Lopez (2015) sur base des données de Kim et Svendsen (2007)	Llano-Restrepo et Araujo-Lopez (2015) sur base des données d'Arcis et al. (2011)
La pression de vapeur	Riedel (1954)	Antoine (1888)
La diffusivité du CO ₂	Jamel (2002)	Ying et Eimer (2012)

D'après les résultats de la comparaison illustrés à la **figure 27**, pour les différents essais (R 3, 8, 13-15, 18, 21-23) de [Sonderby et al. \(2013\)](#), nous pouvons arriver aux conclusions suivantes :

En général, la diminution de l'écart du modèle entre les deux cas est très importante; elle peut atteindre plus de 18% et 4% pour les profils de la température et de la charge du CO₂ en phase liquide, respectivement. Ce qui est plus important pour la température que pour la charge du CO₂; cela pourrait s'expliquer par le fait que presque tous les paramètres du modèle étudiés dans cet article ont un grand impact sur la température du liquide contrairement à la charge du CO₂ où l'influence est mineure. Enfin, cette comparaison montre clairement l'importance de cette étude sur l'obtention des prévisions fiables du modèle, vu la réduction importante de la déviation du modèle obtenue lors de l'estimation de ses paramètres au moyen des corrélations les plus précises.

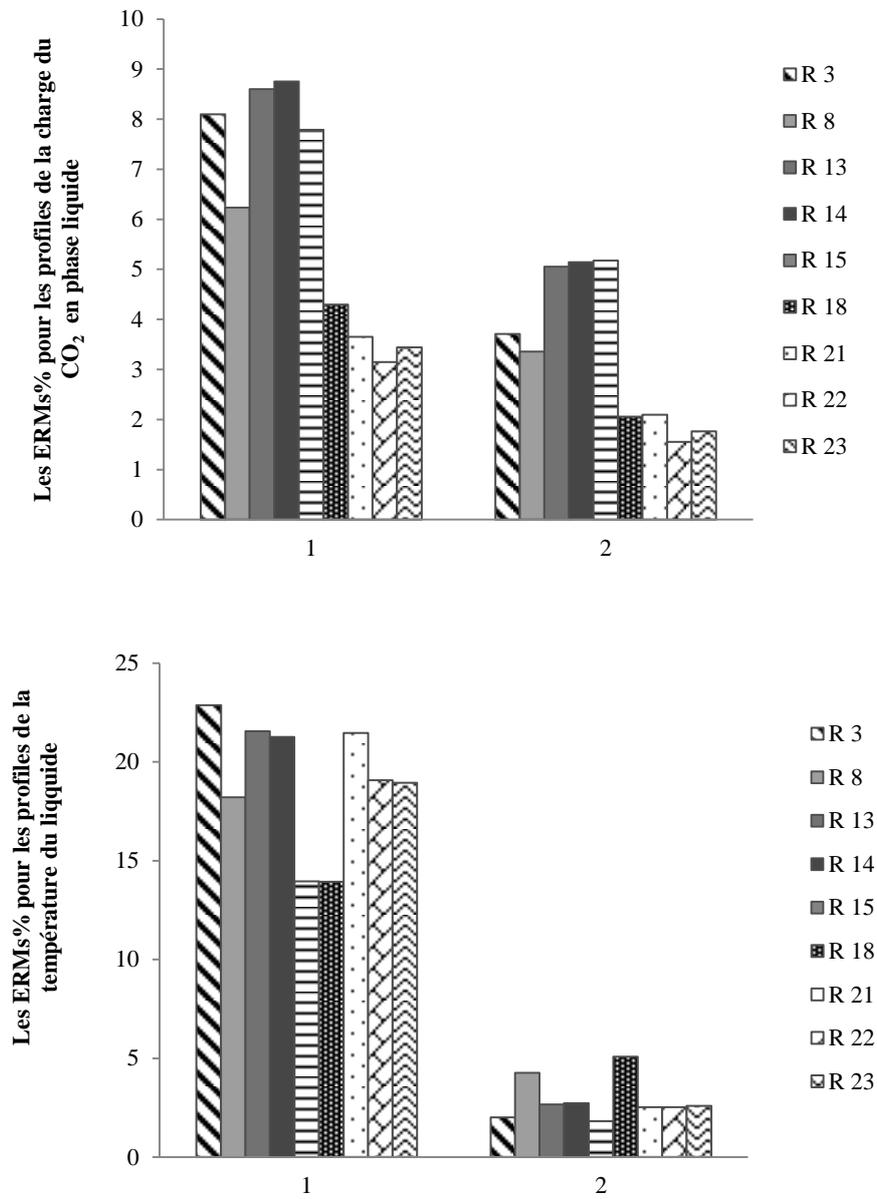


Figure 27. Résultats de la comparaison pour les essais (R 3, 8, 13-15, 18, 21-23) de Sonderby et al. (2013)

CONCLUSION GENERALE

Dans cette étude, un modèle rigoureux basé sur les taux qui décrit l'absorption réactive du CO₂ avec une solution aqueuse de MEA chargée dans un absorbeur à garnissage a été développé. Le modèle a ensuite été implémenté dans le logiciel Matlab afin de résoudre les équations différentielles (les bilans massique et énergétique). Les résultats de la simulation obtenus ont été validés avec succès par rapport à un certain nombre de mesures expérimentales rapportées dans la littérature.

L'un des défis rencontrés lors de la modélisation et la simulation est le calcul correct des paramètres du modèle; c'est pourquoi une étude paramétrique a été réalisée en analysant l'influence de cinq paramètres différents (le modèle cinétique, le facteur d'accélération, l'enthalpie d'absorption, la diffusivité du CO₂ dans les solutions aqueuses de MEA et la pression de vapeur) sur les performances de la colonne. Par conséquent, les points suivants peuvent être déduits

- Parmi les paramètres du modèle étudiés dans ce travail, seuls le modèle cinétique et la pression de vapeur ont une grande influence sur la charge du CO₂ en phase liquide.
- Certains paramètres présentent une grande influence sur la température du liquide (le modèle cinétique, l'enthalpie d'absorption et la pression de vapeur); ils doivent donc être choisis avec beaucoup de soin.
- L'effet du facteur d'accélération et de la diffusivité du CO₂ n'est pas très important par conséquent, un mauvais choix du modèle n'entraîne pas de déviation grave.
- Le modèle cinétique introduit par Luo et al. (2015), le modèle largement utilisé développé par Van Krevelen et Hoftijzer (1948) pour la prédiction du facteur d'accélération, la corrélation développée par Llano-Restrepo et Araujo-Lopez (2015) sur la base des données d'Arcis et al. (2011) pour l'estimation de l'enthalpie d'absorption, l'expression de la pression de vapeur d'Antoine (1888), et la corrélation de Ying et Eimer (2012) pour le calcul de la diffusivité du CO₂ dans la solution aqueuse de MEA chargée fournissent généralement des prédictions plus précises des valeurs empiriques par rapport aux autres cas utilisés dans cette analyse.

En outre, la comparaison entre les deux combinaisons de différents paramètres du modèle qui présentent les ERM% les plus élevées et les plus faibles a révélé que l'écart du modèle

pouvait être réduit de 18 % et de 4 % pour les profils de température et de charge du CO₂ en phase liquide, respectivement.

BIBLIOGRAPHIE

- Aboudheir, A.; Tontiwachwuthikul, P.; Chakma, A.; Idem, R.: Kinetics of the reactive absorption of carbon dioxide in high CO₂-loaded concentrated aqueous monoethanolamine solutions. *Chem. Eng. Sci.* 2003, vol.58, pp.5195-5210.
- Abu-Zahra, M.R.M.; Shneiders, L.H.J.; Niederer, J.P.M.; Feron, P.H.M.; Versteeg, G.F.: CO₂ capture from power plants. Part I. A parametric study of the technical performance based on monoethanolamine. *Int. J. Greenh. Gas Control.* 2007, vol. 1, pp.37-46 .
- Ackermann, G.: Heat transfer and molecular mass transfer in the same field at high temperature and partial pressure differences. *VDI-Forschungsheft.* 1937, vol. 382, pp. 1-16.
- Afkhamipour, M.; Mofarahi, M.: Comparison of rate-based and equilibrium-stage models of a packed column for post-combustion CO₂ capture using 2-amino-2-methyl-1-propanol (AMP) solution. *Int. J. Greenh. Gas Control.* 2013, vol. 15, pp. 186-199.
- Afkhamipour, M.; Mofarahi, M.: Sensitivity analysis of the rate-based CO₂ absorber model using amine solutions (MEA, MDEA and AMP) in packed columns. *Int. J. Greenh. Gas Control.* 2014, vol. 25, pp. 9-22.
- Agbonghae, E.O.; Hughes, K.J.; Ingham, D.B.; Ma, L.; Pourkashanian, M.: A semi-empirical model for estimating the heat capacity of aqueous solutions of alkanolamines for CO₂ capture. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2014, vol. 53, pp. 8291-8301.
- Akinola, T. E.; Oko, E.; Wang, M.: Study of CO₂ removal in natural gas process using mixture of ionic liquid and MEA through process simulation. *Fuel.* 2019, vol. 236, pp. 135-146.
- Al-Baghli, N.A.; Pruess, S.A.; Yesavage, V.F.; Selim, M.S.: A rate-based model for the design of gas absorbers for the removal of CO₂ and H₂S using aqueous solutions of MEA and DEA. *Fluid Phase Equilib.* 2001, vol. 185, pp. 31-43.
- Al-Ghawas, H.A.; Hagewiesche, D.P.; Ruiz-Ibanez, G.; Sandall, O.C.: Physicochemical properties important for carbon dioxide absorption in aqueous methyldiethanolamine. *J. Chem. Eng. Data.* 1989, vol. 34, pp. 385-391.
- Ali Saleh Bairq, Z.; Gao, H.; Huang, Y.; Zhang, H.; Liang, Z.: Enhancing CO₂ desorption performance in rich MEA solution by addition of SO₄²⁻/ ZrO₂/ SiO₂ bifunctional catalyst. *Appl. Energ.* 2019, vol. 252, pp. 1-1.
- Ambrose, D.; and Walton, J.: Vapor pressures up to their critical temperatures of normal alkanes and 1-alkanols. *Pure & Appl. Chem.* 1989, vol. 61, pp. 1395-1403.
- Amundsen, T. G.; Øi, L. E.; Eimer, D. A.: Density and Viscosity of Monoethanolamine + Water + Carbon Dioxide from (25 to 80) °C. *J. Chem. Eng. Data.* 2009, vol. 54, pp. 3096-3100.
- Antoine, C.: Tensions of the vapors; new relationship between the voltages and temperatures. *Rec. Meet. Acad. Sci.* 1888, vol. 107, pp. 681-684.
- Arcis, H.; Ballerat-Busserolles, K.; Rodier, L.; Coxam, J.-Y.: Enthalpy of solution of carbon dioxide in aqueous solutions of monoethanolamine at temperatures of 322.5 K and 372.9 K and pressures up to 5 MPa. *J. Chem. Eng. Data.* 2011, vol. 56, pp. 3351-3362.
- Asprion, N.: Non-equilibrium rate-based simulation of reactive systems: simulation model, heat transfer, and influence of film discretization. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2006, vol. 45, pp. 2054-2069.
- Billet, R.; Schultes, M.: Prediction of mass transfer columns with dumped and arranged packings. *Chem. Eng. Res. Des.* 1999, vol. 77, pp. 498-504.
- Blauwhoff, P.M.M.; Versteeg, G.F.; van Swaaij, W.P.M.: A study on the reaction between CO₂ and alkanolamines in aqueous solutions. *Chem. Eng. Sci.* 1983, vol. 38, pp. 1411-1429.

Booth, N. J.: [Secondment to the International Test Centre for CO₂ capture \(ITC\)](#). *University of Regina*, Canada, January-March 2005.

Boot-Handford, M.E.; Abanades, J.C.; Anthony, E.J.; Blunt, M.J.; Brandani, S.; Dowell, N.M.; Fernández, J.R.; Ferrari, M.-C.; Gross, R.; Hallett, J.P.; Haszeldine, R.S.; Heptonstall, P.; Lyngfelt, A.; Makuch, Z.; Mangano, E.; Porter, R.T.J.; Pourkashanian, M.; Rochelle, G.T.; Shah, N.; Yao, J.G.; Fennell, P.S.: [Carbon capture and storage update](#). *Energy Environ. Sci.* 2014, vol. 7, pp. 130-189.

Brian, P.L.T.; Hurley, J. F.; Hasseltine, E.H.: [Penetration theory for gas absorption accompanied by a second order chemical reaction](#). *AIChE J.* 1961, vol. 7, pp. 226-231.

Browning, G.J.; Weiland, R.H.: [Physical solubility of carbon dioxide in aqueous alkanolamines via nitrous oxide analogy](#). *J. Chem. Data.* 1994, vol. 39, pp. 817-822.

Carson, J. K.; Marsh, K. N.; Mather, A. E.: [Enthalpies of solution of carbon dioxide in \(water + MEA or DEA or MDEA\) and \(water +MEA + MDEA\) at 298.15 K](#). *J. Chem. Thermodyn.* 2000, vol. 32, pp. 1285-1296.

Chakravati, S.; Gupta, A.; Hunek, B.: [Advanced technology for the capture of carbon dioxide from flue gases](#). In: *1st National Conference on Carbon Sequestration*, Washington, DC, 2001.

Chiu, L. F., Liu, H. F., Li, M. H.: [Heat capacity of alkanolamines by differential scanning calorimetry](#). *J. Chem. Eng. Data.* 1999, vol. 44, pp. 631-636.

Chueh, C. F.; Swanson, A. C.: [Estimation of Liquid Heat Capacity](#). *Can. J. Chem. Eng.* 1973, vol. 51, pp. 596-600.

Clarke, J. K. A.: [Kinetics of absorption of Carbon Dioxide in Monoethanolamine at Short Contact Times](#). *Ind. Eng. Chem. Fundam.* 1964, vol. 3, pp. 239-245.

Climate Change.: [Mitigation of Climate Change -Working Group III Contribution to the Fifth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change](#), 2014.

Comité International des Poids et Mesures. *Metroloogia* (1969).

Cullen, E. J.; Davidson, J. F.: [Absorption of Gas in Liquid Jet](#). *Trans. Faraday. Soc.* 1957, vol. 53, pp. 113-120.

Cussler, E.L.: [Diffusion-Mass Transfer in Fluid Systems](#), 3rd ed. *Cambridge University Press*, Cambridge, 2009.

Danckwerts, P.V.; Sharma, M.M.: [The absorption of carbon dioxide into solutions of alkalis and amines](#). *Chem. Eng.* 1966, vol. 10, pp. 244-280.

Dang, H.; Rochelle, G. T.: [CO₂ Absorption Rate and Solubility in Monoethanolamine/Piperazine/Water](#). *Sep. Sci. Technol.* 2003, vol. 38, pp. 337-357.

Daubert, T.E.; Danner, R.P.; Sibul, H.M.; Stebbins, C.C.: [DIPPR data compilation of pure compound properties. Project 801, Sponsor Release](#). *Design Institute for Physical Property Data, AIChE*, New York, 1993.

Davidson, R.M.: [Post-combustion Carbon Capture from Coal Fired Plants-Solvent Scrubbing](#). *IEA Clean Coal Centre, CCC/125*, 2007.

DeCoursey, W.J.: [Enhancement factors for gas absorption with reversible reaction](#). *Chem. Eng. Sci.* 1982, vol. 37, pp. 1483-1489.

DeCoursey, W.J.; Thring, R.W.: [Effects of unequal diffusivities on enhancement factors for reversible and irreversible reaction](#). *Chem. Eng. Sci.* 1989; vol. 44, pp. 1715-1721.

DiGuillo, R. M.; Lee, R. J.; Schaeffer, S. T.; Brasher, L. L.; Teja, A. S.: [Densities and Viscosities of the Ethanolamines](#). *J. Chem. Eng. Data.* 1992, vol. 37, pp. 239-242.

Duda, J.F.; Verntas, J.C.: [Laminar liquid jet diffusion studies](#). *AIChE J.* 1968, vol. 14, pp. 286-294.

Dugas, R. E.; Rochelle, G. T.: [CO₂ absorption rate into concentrated aqueous monoethanolamine and piperazine](#). *J. Chem. Eng. Data.* 2011, vol. 56, pp. 2187-2195.

Dutcher, B.; Fan, M.; Russell, A.G: Amine-based CO₂ capture technology development from the beginning of 2013; a review. *ACS Appl. Mater. Interfaces*. 2015, vol. 7, pp. 2137-2148.

Ellis, A.J.; Golding, R.M.: The solubility of carbon dioxide above 100°C in water and in sodium chloride solutions. *Am. J. Sci.* 1963, vol. 261, pp. 47-60.

Faramarzi, L.: Post-Combustion Capture of CO₂ from Fossil Fuelled Power Plants. *PhD Thesis, University of Denmark, Denmark*, 2010.

Figueroa, J. D.; Fout, T.; Plasynski, S.; McIlvried, H.; Srivastava, R. D.: Advances in CO₂ capture technology; the US Department of Energy's Carbon Sequestration Program. *Int. J. Greenh. Gas Control*. 2008, vol. 2, pp. 9-20.

Fitz, C.W.; Kunesh, J.G.; Shariat, A.: Performance of structured packing in a commercial-scale column at pressures of 0.02–27.6 bar. *Ind. Eng. Chem. Res.* 1999, vol. 38, pp. 512-518.

Freguia, S.; Rochelle, G.T.: Modeling of CO₂ capture by aqueous monoethanolamine. *Am. Inst. Chem. Eng. J.* 2003, vol. 49, pp. 1676-1686.

Gaspar, J.; Fosbøl, P.L.: A general enhancement factor model for absorption and desorption systems: A CO₂ capture case-study. *Chem. Eng. Sci.* 2015, vol. 138, pp. 203-215.

Geankoplis, C.J.: Transport Processes and Separation Process Principles, 4th ed. *Prentice-Hall*, 2003.

Gilliland, E.R.; Baddour, R.F.; Brian, P.L.T.: Gas absorption accompanied by a liquid-phase chemical reaction. *AIChE. J.* 1958, vol. 4, pp. 223-230.

Gupta, M.; Coyle, I.; Thambimuthu, K.: CO₂ capture technologies and opportunities in Canada, Strawman document for CO₂ capture and storage (CC&S) technology roadmap. In: *Proceedings of the 1st Canadian CC&S Technology Roadmap Workshop*, 18–19 September 2003, Calgary, Alberta, Canada, 2003.

Haimour, N.; Sandall, O.C.: Absorption of carbon dioxide into aqueous methyldiethanolamine. *Chem. Eng. Sci.* 1984, vol. 39, pp. 1791-1796.

Han, J.; Jin, J.; Eimer, D.A.; Melaaen, M.C.: Density of water (1) + monoethanolamine (2) + CO₂ (3) from (298.15 to 413.15) K and surface tension of water (1) + monoethanolamine (2) from (303.15 to 333.15) K. *J.Chem. Eng. Data*. 2012, vol. 57, pp. 1095-1103.

Hatta, S.: Technical reports. *Tohoku Imp Univ.* Sendai, 1928.

Henley, E.J., Seader, J.D.: Equilibrium Stage Separation Operations in Chemical Engineering. *Wiley*, New York, 1981.

Higler, A.; Krishna, R.; Taylor, R.: Non-equilibrium cell model for multicomponent (reactive) separation processes. *Am. Inst. Chem. Eng. J.* 1999, vol. 45, pp. 2357-2370.

Hikita, H.; Asai, S.; Ishikawa, H.; Honda, M.: The kinetics of reactions of carbon dioxide with monoethanolamine, diethanolamine and triethanolamine by a rapid mixing method. *Chem. Eng. J.* 1977, vol. 13, pp. 7-12.

Hikita, H.; Asai, S.; Katsu, Y.; Ikuno, S.: Absorption of carbon dioxide into aqueous monoethanolamine solutions. *Am. Inst. Chem. Eng. J.* 1979, vol. 25, pp. 793-800.

Hikita, H.; Asai, S.; Yano, A.; Nose H.: Kinetics of absorption of carbon dioxide into aqueous sodium sulfite solutions. *AIChE. J.* 1982, vol. 28, pp. 1009-1015.

Hilliard, M. D.: A predictive thermodynamic model for an aqueous blend of potassium carbonate, piperazine, and monoethanolamine for carbon dioxide capture from flue gas. *PhD Thesis, The University of Texas*, Austin, TX, 2008.

Hogendoorn, J.A.; Vas Bhat, R.D.; Kuipers, J.A.M.; Van Swaaij, W.P.M.; Versteeg, G.F.: Approximation for the enhancement factor applicable to reversible reactions of finite rate in chemically loaded solutions. *Chem. Eng. Sci.* 1997, vol. 52, pp. 4547-4559.

Holderbaum, T.; Gmehling, J. PSRK.: a group contribution equation of state based on UNIFAC. *Fluid. Phase. Equilib.* 1991, vol. 70, pp. 251-265.

Hornig, S.-Y.; Li, M.-H.: Kinetics of absorption of carbon dioxide into aqueous solutions of

monoethanolamine + triethanolamine. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2002, vol. 41, pp. 257-266.

Hsu, C.; Li, M.,1.: Densities of aqueous blended amines. *J. Chem. Eng. Data.* 1997a, vol. 42, pp. 502-507.

Hsu, C.; Li, M.: Viscosities of aqueous blended amines. *J. Chem. Eng. Data.* 1997b, vol. 42, pp. 714-720.

IEA GHG.: The Capture of Carbon dioxide from Fossil Fuel Fired Power Stations. *IEA GHG; IEA GHG/SR2*, Cheltenham, UK, 1993.

IEA.: CO₂ Emissions from Fuel Combustion. Paris, 2016.

IEA.: Prospects for CO₂ Capture and Storage. *OECD/IEA*, Paris, France, 2004.

IEA.: World Energy Outlook 2007 – China and India Insights: Executive Summary. *OECD/IEA*, Paris, France, 2007.

IPCC: Intergovernmental Panel on Climate Change Fourth Assessment Report: Climate Change 2007-Mitigation of Climate Change. *Cambridge University Press*, Cambridge, 2007.

Jamal, A.: Absorption and desorption of CO₂ and CO in alkanolamine systems. *PhD Thesis, University of British Columbia*, Canada, 2002.

Jamal, A.; Meisen, A.; Lim, C.J.: Kinetics of carbon dioxide absorption and desorption in aqueous alkanolamine solutions using a novel hemispherical contactor: experimental results and parameter estimation. *Chem. Eng. Sci.* 2006, vol. 61, pp. 6590-6603.

Jayarathna, S.A.; Weerasooriya, A.; Dayarathna, S.; Eimer, D.A.; Melaaen, M.C.: Densities and surface tensions of CO₂ loaded aqueous monoethanolamine solutions with $r = (0.2 \text{ to } 0.7)$ at $T = (303.15 \text{ to } 333.15) \text{ K}$. *J. Chem. Eng. Data.* 2013, vol. 58, pp. 986-992.

Jiru, Y.; Eimer, D.A.; Wenjuan, Y.: Measurements and correlation of physical solubility of carbon dioxide in (monoethanolamine + water) by a modified technique. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2012, vol. 51, pp. 6958-6966.

Joosten, G. E. H.; Danckwerts, P. V.: Solubility and diffusivity of nitrous oxide in equimolar potassium carbonate-potassium bicarbonate solutions at 25.deg. and 1 atm. *J. Chem. Eng. Data.* 1972, vol. 17, pp. 452-454.

Kale, C.; Górak, A.; Schoenmakers, H.: 2013. Modelling of the reactive absorption of CO₂ using mono-ethanolamine. *Int. J. Greenh. Gas Control.* 2013, vol. 17, pp. 294-308.

Kanniche, M.; Gros-Bonnivard, R.; Jaud, P.; Valle-Marcos, J.; Amann, J.-M.; Bouallou, C: Pre-combustion, post-combustion and oxy-combustion in thermal power plant for CO₂ capture. *Appl. Therm. Eng.* 2010, vol. 30, pp. 53-62.

Kell, G. S.: Density, Thermal Expansivity, and Compressibility of Liquid Water from 0 to 150 °C: Correlations and Tables for Atmospheric Pressure and Saturation reviewed and Expressed on 1968 Temperature Scale. *J. Chem. Eng. Data.* 1975, vol. 20, pp. 97-105.

Kenig, E.; Seferlis, P.: Modeling reactive absorption. *Chem. Eng. Prog.* 2009, vol. 105, pp. 65-73.

Kenig, E.Y.; Kucka, L.; Górak, A.: Rigorous modeling of reactive absorption processes. *Chem. Eng. Technol.* 2003, vol. 26, pp. 631-646.

Kenig, E.Y.; Wiesner, U.; Górak, A.: Modeling of reactive absorption using the Maxwell–Stefan equations. *Ind. Eng. Chem. Res.* 1997, vol. 36, pp. 4325-4334.

Khan, F.M.; Krishnamoorthi, V.; Mahmud, T.: Modeling reactive absorption of CO₂ in packed columns for post-combustion carbon capture applications. *Chem. Eng. Res. Des.* 2011, vol. 89, pp. 1600-1608.

Kim, I.: Heat of Reaction and Vapor–Liquid Equilibrium of Post Combustion CO₂ Absorbents. *PhD Thesis, Norwegian University of Science and Technology*, Trondheim, Norway, 2009.

Kim, I.; Svendsen, H.F.: Heat of absorption of carbon dioxide (CO₂) in monoethanolamine (MEA) and 2-(aminoethyl) ethanolamine (AEEA) solutions. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2007, vol. 46, pp. 5803-5809.

Klöker, M.; Kenig, E.Y.; Hoffmann, A.; Kreis, P.; Górak, A.: Rate-based modelling and simulation of reactive separations in gas/vapour–liquid systems. *Chem. Eng. Process.* 2005, vol. 44, pp. 617-629.

Ko, J. J.; Tsai, T. C.; Lin, C. Y.: Diffusivity of Nitrous Oxide in Aqueous Alkanolamine Solutions. *J. Chem. Eng. Data.* 2001, vol. 46, pp. 160-165.

Kohl, A.L.; Nielsen, R.B.: *Gas Purification*, 5th ed. *Gulf Publishing Co*, Houston, 1997.

Krishnamurthy, R.; Taylor, R.: A non-equilibrium stage model of multicomponent separation processes. Part I: Model description and method of solution. *Am. Inst. Chem. Eng. J.* 1985a, vol. 31, pp. 449-456.

Krishnamurthy, R.; Taylor, R.: Absorber simulation and design using a non-equilibrium stage model. *Can. J. Chem. Eng.* 1986, vol. 64, pp. 96-105.

Krishnamurthy, R.; Taylor, R.: Simulation of packed distillation and absorption columns. *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.* 1985b, vol. 24, pp. 513-524.

Kucka, L.; Kenig, E.Y.; Górak, A.: Kinetics of the gas–liquid reaction between carbon dioxide and hydroxide ions. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2002, vol. 41, pp. 5952-5957.

Kucka, L.; Richter, J.; Kenig, E.Y.; Górak, A.: Determination of gas–liquid reaction kinetics with a stirred cell reactor. *Sep. Purif. Technol.* 2003, vol. 31, pp. 163-175.

Kvamsdal, H.; Rochelle, G.: Effects of the temperature bulge in CO₂ absorption from flue gas by aqueous monoethanolamine. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2008, vol. 47, pp. 867-875.

Kvamsdal, H.M.; Jakobsen, J.P.; Hoff, K.A.: Dynamic modeling and simulation of a CO₂ absorber column for post-combustion CO₂ capture. *Chem. Eng. Process.* 2009, vol. 48, pp. 135-144.

Kvamsdala, H.; Hillestad, M.: Selection of model parameter correlations in a rate-based CO₂ absorber model aimed for process simulation. *Int. J. Greenh. Gas Control.* 2012, vol. 11, pp. 11-20.

Last, W.; Stichlmair, J.: Determination of mass transfer parameters by means of chemical absorption. *Chem. Eng. Technol.* 2002, vol. 25, pp. 385-391.

Lawal, A.; Wang, M.; Stephenson, P.; Yeung, H. Dynamic modelling of CO₂ absorption for post combustion capture in coal-fired power plants. *Fuel.* 2009, vol. 88, pp. 2455-2462.

Lee, L. L.: *Thermodynamic Models for Natural Gas Sweetening Fluids. Annual report to Gas Research Institute*, University of Oklahoma, Norman, OK, 1994.

Lee, M.; Lin, T.: Density and Viscosity for Monoethanolamine + Water, + Ethanol, and + 2-Propanol. *J. Chem. Eng. Data.* 1995, vol. 40, pp. 336-339.

Li, M. H.; Lai, M. D.: Solubility and Diffusivity of N₂O and CO₂ in (Monoethanolamine+ N-Methyldiethanolamine + Water) and in (Monoethanolamine + 2-Amino-2-Methyl-1-Propanol + Water). *J. Chem. Eng. Data.* 1995, vol. 40, pp. 486-492.

Li, M. H.; Lie, Y. C.: Densities and Viscosities of Solutions of Monoethanolamine + N-Methyldiethanolamine + Water and Monoethanolamine + 2-Amino-2-methyl-1-propanol + Water. *J. Chem. Eng. Data.* 1994, vol. 39, pp. 444-447.

Li, M. H.; Shen, K. P.: Densities and Solubilities of Solutions of Carbon Dioxide in Water + Monoethanolamine + N-Methyldiethanolamine. *J. Chem. Eng. Data.* 1992, vol. 37, pp. 288-290.

Li, M.H.;Lee, W.C.: Solubility and diffusivity of N₂O and CO₂ in (diethanolamine + N-methyldiethanolamine +water) and in (diethanolamine + 2- amino-2-methyl-1 -propanol + water). *J. Chem. Eng. Data.* 1996, vol. 41, pp. 551.

Lide, D. R.: *Handbook of Organic Solvents. CRC Press*, Boca Raton, FL, 1995.

Littel, R. J.; Versteeg, G. F.; Van Swaaij, W. P. M.: Kinetics of CO₂ with primary and secondary amines in aqueous solutions-II. Influence of temperature on zwitterion formation and deprotonation rates. *Chem. Eng. Sci.* 1992, vol. 47, pp. 2037-2045.

Liu, F.; Fang, M.; Dong, W.; et al.: Carbon dioxide absorption in aqueous alkanolamine blends for biphasic solvents screening and evaluation. *Appl. Energy*. 2019, vol. 234, pp. 468-477.

Llano-Restrepo, M.; Araujo-Lopez, E.: Modeling and simulation of packed-bed absorbers for post-combustion capture of carbon dioxide by reactive absorption in aqueous monoethanolamine solutions. *Int. J. Greenh. Gas Control*. 2015, vol. 42, pp. 258-287.

Luo, X.; Hartono, A.; Hussain, S.; Svendsen, H.F.: Mass transfer and kinetics of carbon dioxide absorption into loaded aqueous monoethanolamine solutions. *Chem. Eng. Sci.* 2015, vol. 123, pp. 57-69.

Luo, X.; Hartono, A.; Svendsen, H. F.: Comparative kinetics of carbon dioxide absorption in unloaded aqueous monoethanolamine solutions using wetted wall and string of discs columns. *Chem. Eng. Sci.* 2012, vol. 82, pp. 31-43.

Maceiras, R.; Alvarez, E.; Cancela, M.A.: Effect of temperature on carbon dioxide absorption in monoethanolamine solutions. *Chem. Eng. J.* 2008, vol. 138, pp. 295-300.

Maham, Y.; Lebrette, L.; Mather, A. E.: Viscosities and Excess Properties of Aqueous Solutions of Mono- and Diethylethanolamines at Temperatures between 298.15 and 353.15 K. *J. Chem. Eng. Data*. 2002a, vol. 47, pp. 550-553.

Maham, Y.; Liew, C.-N.; Mather, A. E.: Viscosities and Excess Properties of Aqueous Solutions of Ethanolamines from 25 to 80±C. *J. Solution Chem.* 2002b, vol. 31, pp. 743-756.

Maham, Y.; Teng, T. T.; Hepler, L. G.; Mather, A. E.: Densities, Excess Molar Volumes, and Partial Molar Volumes for Binary Mixtures of Water with Monoethanolamine, Diethanolamine, and Triethanolamine from 25 to 80 °C. *J. Solution Chem.* 1994, vol. 23, pp. 195-205.

Malinin, S.D.: Thermodynamics of the H₂O - CO₂ systems. *Geochem. Int.* 1975, vol. 11, pp. 1523-1574.

Mantripragada, H.C.; Zhai, H.; Rubin, E.S.: Boundary Dam or Petra Nova-which is a better model for CCS energy supply. *Int. J. Greenh. Gas Control*. 2019, vol. 82, pp. 59-68.

Markham, A.E.; Kobe, K.A.: The Solubility of Carbon Dioxide and Nitrous Oxide in Aqueous Salt Solutions. *Ind. Eng. Chem.* 1941, vol. 63, pp. 449-454.

Mathias, P.M.; O'Connell, J.P.: The Gibbs-Helmholtz equation and the thermodynamic consistency of chemical absorption data. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2012, vol. 51, pp. 5090-5097.

Mathonat, C.; Majer, V.; Mather, A. E.; Grolier, J.-P. E.: Use of Solubility of CO₂ in Aqueous Monoethanolamine Solutions. *Ind. Eng. Chem. Res.* 1998, vol. 37, pp. 4136-4141.

Matin, N.S.; Remias, J.E.; Neathery, J.K.; Liu, K.: Facile method for determination of amine speciation in CO₂ capture solutions. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2012, vol. 51, pp. 6613-6618.

Mofarahi, M.; Khojasteh, Y.; Khaledi, H.; Farahnak, A.: Design of CO₂ absorption plant for recovery of CO₂ from flue gases of gas turbine. *Energy*. 2008, vol. 33, pp. 1311-1319.

Mohammadpour, A.; Mirzaei, M.; Azimi, A.: Dimensionless numbers for solubility and mass transfer rate of CO₂ absorption in MEA in presence of additives. *Chem. Eng. Res. Des.* 2019, vol. 151, pp. 207-213.

Moulijn, J.A.; Stankiewicz, A.; Grievink, J.; Górak, A.: Process intensification and process systems engineering: a friendly symbiosis. *Comput. Chem. Eng.* 2008, vol. 32, pp. 3-11.

Murrieta-Guevara, F.; Rodriguez, A. T.: Liquid Density as a Function of Temperature of Five Organic Solvents. *J. Chem. Eng. Data*. 1984, vol. 29, pp. 204-206.

Noeres, C.; Kenig, E.Y.; Górak, A.: Modelling of reactive separation processes: reactive absorption and reactive distillation. *Chem. Eng. Process.* 2003, vol. 42, pp. 157-178.

Pagé, M.; Huot, J.; Jolicoeur, C.: A comprehensive thermodynamic investigation of water-ethanolamine mixtures at 10, 25, and 40°C. *Can. J. Chem.* 1993, vol. 71, pp. 1064-1072.

Pandya, J.D.: Adiabatic gas absorption and stripping with chemical reaction in packed towers. *Chem. Eng. Commun.* 1983, vol. 19, pp. 343-361.

Penttilä, A.; Dell'Era, C.; Uusi-Kyyn., P.; Alopaeus, V.: The Henry's law constant of N₂O and CO₂ in aqueous binary and ternary amine solutions (MEA, DEA, DIPA, MDEA, and AMP). *Fluid Phase Equilib.* 2011, vol. 311, pp. 59-66.

Perry, J.H.; Chilton, C H.; Kirkpatrick S.D.: *Chemical Engineers' Handbook*. 5th and 6th Ed, *McGraw Hill*, New York, 1963, 1984.

Pinsent, B.R.; Pearson, L.; Roughton, F.J.W.: The kinetics of combination of carbon dioxide with hydroxide ions. *Trans. Faraday Soc.* 1956, vol. 52, pp. 1512-1520.

Pitzer, K. S.; Curl, R. F.: *The Thermodynamic Properties of Fluids*. *Inst. Mech. Eng*, London, 1957.

Plaza, J.M.: Modeling of Carbon Dioxide Absorption Using Aqueous Monoethanolamine, Piperazine and Promoted Potassium Carbonate. *PhD Thesis, The University of Texas*, Austin, TX, 2011.

Poling, B.E.; Prausnitz, J.M.; O'Connell, J.P.: *The Properties of Gases and Liquids*. *McGraw-Hill*, New York, 2001.

Pouryosefi, F.; Idem, R. O.: New Analytical Technique for Carbon Dioxide Absorption Solvents. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2008, vol. 47, pp. 1268-1276.

Puxty, G.; Rowland, R.; Attalla, M.: Comparison of the rate of CO₂ absorption into aqueous ammonia and monoethanolamine. *Chem. Eng. Sci.* 2010, vol. 65, pp. 915-922.

Reid, R.C.; Prausnitz, J.M.; Poling, B.E.: *The Properties of Gases and Liquids*. *Mc-Graw Hill*, New York, 1987.

Riddick, J. A.; Bunger, W. B.; Sakano, T. K.: *Organic Solvents*, 4th ed. *Wiley*, New York, 1986.

Riedel, L.: Extension of the theorem of corresponding states. III. Critical coefficient, density of saturated vapor, and latent heat of vaporization. *Chem. Ing. Tech.* 1954, vol. 26, pp. 679-683.

Rochelle, G.T.: Amine scrubbing for CO₂ capture. *Sci.* 2009, vol. 325, pp. 1652-1654.

Sada, E.; Kito, S.: Solubilities of Gases in Aqueous Monoethanolamine Solutions. *Kagaku Kogaku*. 1972, vol. 36, pp. 218-220.

Sada, E.; Kumazawa, H.; Butt, M. A.: Solubility and Diffusivity of Gases in Aqueous Solutions of Amines. *J. Chem. Eng. Data*. 1978, vol. 23, pp. 161-163.

Sada, E.; Kumazawa, H.; Butt, M.A.: Solubilities of gases in aqueous solutions of amine. *J. Chem. Eng. Data*. 1977, vol. 22, pp. 277-278.

Saha, A.K.; Bandyopadhyay, S.S.; Biswas, A.K.: Solubility and diffusivity of N₂O and CO₂ in aqueous solutions of 2-amino-2-methyl-1-propanol. *J. Chem. Eng. Data*. 1993, vol. 38, pp. 78-82.

Sandall, O.C.; Rinker, E.B.; Ashour, S.: Acid gas treating by aqueous alkanolamines. *Annual report to the Gas Research Institute*, 1993.

Seader, J.D.: The rate-based approach for modeling staged separations. *Chem.Eng. Prog.* 1989, vol. 85, pp. 41-49.

Simon, L.; Yannick, E.; Graeme, P.; Artanto, Y.; Hungerbuhler, K.: Rate based modeling and validation of a carbon-dioxide pilot plant absorption column operating on monoethanolamine. *Chem. Eng. Res. Des.* 2011; vol. 89, pp. 1684-1692.

Sivasubramanian, M.S.; Taylor, R.; Krishnamurthy, R.: A non-equilibrium stage model of multicomponent separation processes. Part IV: A novel approach to packed column design. *Am. Inst. Chem. Eng. J.* 1987, vol. 33, pp. 325-327.

Smith, J.M.; van Ness, H.C.; Abbott, M.M.: *Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics*, 7th ed. *McGraw-Hill*, New York, 2005.

Snijder, E.D.; te Riele, M.J.M.; Versteeg, G.F.; Van Swaaij, W.P.M.: Diffusion coefficients of several aqueous alkanolamine solutions. *J. Chem. Eng. Data.* 1993, vol. 38, pp. 475-480.

Soave, G.: Equilibrium constants from a modified Redlich-Kwong equation of state. *Chem. Eng. Sci.* 1972, vol. 27, pp. 1197-1203.

Sonderby, T.L.; Carlsen, K.B.; Fosbol, P.L.; Kiorboe, L.G.; Von Solms, N.: A new pilot absorber for CO₂ capture from flue gases: measuring and modeling capture with MEA solution. *Int. J. Greenh. Gas Control.* 2013, vol. 12, pp. 181-192.

Takenouchi, S.; Kennedy, G.C.: The binary system H₂O-CO₂ at high temperatures and pressures. *Am. J. Sci.* 1964, vol. 262, pp. 1055-1074.

Taylor, R.; Krishna, R.: *Multicomponent Mass Transfer.* Wiley, New York, 1993.

Touhara, H.; Okazaki, S.; Okino, F.; Tanaka, H.; Ikari, K.; Nakanishi, K.: Thermodynamic properties of aqueous mixtures of hydrophilic compounds 2. Aminoethanol and its methyl derivatives. *J. Chem. Thermodyn.* 1992, vol. 14, pp. 145-156.

Treybal, R.E.: Adiabatic gas absorption and stripping in packed towers. *Ind. Eng. Chem.* 1969, vol. 61, pp. 36-41.

Tsai, T. c.; Ko, J. j.; Wang, H. m.; Lin, C. y.; Li, M. h.: Solubility of Nitrous Oxide in Alkanolamine Aqueous Solutions. *J. Chem. Eng. Data.* 2000, vol. 45, pp. 341-347.

Vaidya, P.D.; Kenig, E.Y.: CO₂-alkanolamine reaction kinetics: a review of recent studies. *Chem. Eur. J.* 2007, vol. 30, pp. 1467-1474.

Van Krevelen, D.W.; Hoftijzer, P.J.: Kinetics of gas-liquid reactions. Part I. General theory. *Recl. Trav. Chim. Pays-Bas.* 1948, vol. 67, pp. 563-586.

Van Swaaij, W. P. M.; and Versteeg, G. F.: Mass transfer accompanied with complex reversible chemical reactions in gas-liquid systems: an overview. *Chem. Eng. Sci.* 1992, vol. 47, pp. 3181-3195.

Van Wijngaarden, G. D. L.; Versteeg, G. F.; Beenackers, A. A. C. M.: Mass-transfer enhancement factors for reversible gas-liquid reactions: comparison of DeCoursey's and Onda's methods. *Chem. Eng. Sci.* 1986, vol. 41, pp. 2440-2442.

Versteeg, G. F.; Kuipers, J.A.M.; Van Beckum, F.P.H.; Van Swaaij, W.P.M.: Mass transfer with complex reversible chemical reactions-I. Single reversible chemical reaction. *Chem. Eng. Sci.* 1989, vol. 44, pp. 2295-2310.

Versteeg, G.F.; van Dijck, L.A.J.; van Swaaij, W.P.M.: On the kinetics between CO₂ and alkanolamines both in aqueous and non-aqueous solutions: an overview. *Chem. Eng. Commun.* 1996, vol. 144, pp. 113-158.

Versteeg, G.F.; van Swaaij, W.P.M.: Solubility and diffusivity of acid gases (CO₂, N₂O) in aqueous alkanolamine solutions. *J. Chem. Eng. Data.* 1988, vol. 33, pp. 29-34.

Wang, J.; Deng, S.; Sun, T.; Xu, Y.; Li, K.; Zhao, J.: Thermodynamic and cycle model for MEA-based chemical CO₂ absorption. *Energy Procedia.* 2019, vol. 158, pp. 4941-4946.

Wang, T.; Yu, W.; Liu, F.; et al.: Enhanced CO₂ absorption and desorption by MEA based nanoparticle suspensions. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2016, vol. 55, pp. 7830-7838.

Wang, Y. W.; Xu, S.; Otto, F. D.; Mather, A. E.: Solubility of N₂O in alkanolamines and in mixed solvents. *Chem. Eng. J.* 1992, vol. 48, pp. 31-40.

Weast, R. C.: *Handbook of Chemistry and Physics*, 65th ed. CRC, 1984.

Weiland, R. H., Dingman, J. C., Cronin, D. B.: Heat capacity of aqueous monoethanolamine, diethanolamine, N-methyldiethanolamine, and N-methyldiethanolamine-based blends with carbon dioxide. *J. Chem. Eng. Data.* 1997, vol. 42, pp. 1004-1006.

Weiland, R. H.; Dingman, J. C.; Cronin, D. B.; Browning, G. J.: Density and Viscosity of Some Partially Carbonated Aqueous Alkanolamine Solutions and Their Blends. *J. Chem. Eng. Data.* 1998, vol. 43, pp. 378-382.

Wellek, R.M.; Brunson, R.J.; Law, F.H.: Enhancement factors for gas-absorption with second-order irreversible chemical reaction. *Can. J. Chem. Eng.* 1978, vol. 56, pp. 181-186.

- Wilke, C.R: Diffusional properties of multicomponent gases. *Chem. Eng. Prog.* 46, 95-104, 1950.
- Wu, Y.; Zhou, Q.; Chan, C.W.: A comparison of two data analysis techniques and their applications for modeling the carbon dioxide capture process. *Eng. Appl. Artif. Intell.* 2010, vol. 23, pp. 1265-1276.
- Xu, S.; Otto, F. D.; Mather, A. E.: Physical properties of aqueous AMP solutions. *J. Chem. Eng. Data.* 1991, vol. 36, pp. 71-75.
- Yaws, C. L.; Miller, J. W.; Shah, P. N.; Schorr, G. R.; Patel, P. M.: Physical and thermodynamic properties. 24. Correlation constants for chemical compounds. *Chem. Eng.* 1976, vol. 83, pp. 153.
- Yeremian, A.A.; Gottifredi, J.C.; Ronco, J.J.: Mass transfer with homogeneous second order irreversible reaction a note on an explicit expression for the reaction factor. *Chem. Eng. Sci.* 1970, vol. 25, pp. 1622-1625.
- Ying, J.; Eimer, D.A. Measurements and Correlations of Diffusivities of Nitrous Oxide and Carbon Dioxide in Monoethanolamine + Water by Laminar Liquid Jet. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2012, vol. 51, pp. 16517-16524.
- Ying, J.; Eimer, D.A.: Determination and Measurements of Mass Transfer Kinetics of CO₂ in Concentrated Aqueous Monoethanolamine Solutions by a Stirred Cell. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2013, vol. 52, pp. 2548-2559.
- Ying, J.; Eimer, D.A.: Measurements and Correlations of Diffusivities of Nitrous Oxide and Carbon Dioxide in Monoethanolamine + Water by Laminar Liquid Jet. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2012, vol. 51, pp. 16517-16524.
- Zhang, Y.; Chen, H.; Chen, C.; Plaza, J.M.; Dugas, R.; Rochelle, G.T.: Rate-based process modeling study of CO₂ capture with aqueous monoethanolamine solution. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2009, vol. 48, pp. 9233-9246.
- Zhao, Z.; Cui, X.; Ma, J., Li, R.: Adsorption of carbon dioxide on alkali-modified zeolite 13X adsorbents. *Int. J. Greenhouse Gas Control.* 2007, vol. 1, pp. 355-359.

LISTE DES TRAVAUX DE RECHERCHE EFFECTUES

Hammouche, I.; Selatnia A.; Yassa, S.: Influence of five model parameters on the performance of a CO₂ absorber column by a loaded aqueous MEA solution. *Oil. Gas. Sci. Tech.* 2021, vol. 76, pp. 22.

Hammouche, I.; Selatnia, A.; Derriche, R.: Rigorous modeling and simulation of the reactive absorption of CO₂ with loaded aqueous monoethanolamine solution. *Algerian J. Env. Sc. Technology.* 2021, vol. 7, pp. 1777-1786.