

République Algérienne Démocratique et Populaire  
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique



**Ecole Nationale Polytechnique**  
**Département de Génie Chimique**

**Mémoire de Master**

Thème

**Absorption du CO<sub>2</sub> par une amine**

Présenté par :

Karim MEKBEL

Dirigé par :

Pr. R. DERRICHE

Pr. A. SELATNIA

**Présenté et soutenu publiquement le 15 Juin devant le jury composé de :**

Mr. T. AHMED ZAID

Mme. F. MEZIANI

Mme. S. HADDOUM

Pr (ENP)

MAA (ENP)

Dr (ENP)

Président

Examinatrice

Examinatrice

**Promotion : Juin 2015**

## ملخص

الغرض من هذا العمل هو محاكاة لامتصاص ثاني أكسيد الكربون بواسطة نوعين من الأمينات ذات تركيز عالي نسبياً، إيثانول-2-أمين ثنائي الإثيل و 1-4، بوتان ثنائي الأمين ويتم الحصول على النتائج وفقاً لنموذج رياضي يسمح لنا بتقدير تركيز ثاني أكسيد الكربون والأمين عند مخرج عمود الامتصاص .

تم إجراء المحاكاة من خلال اتخاذ أبعاد عمود الامتصاص في دائرة الهندسة الكيميائية لتركيزات متعددة للأمين وعلى درجات حرارة مختلفة وأيضاً مع التغيير في تدفق غاز ثاني أكسيد الكربون مع مراقبة تطور معدل الامتصاص.

وأظهرت نتائج المحاكاة أن 1،4-بوتان ثنائي الأمين أكثر امتصاصاً لغاز ثاني أكسيد الكربون من الإيثانول 2-أمين ثنائي الإثيل .

كلمات البحث: الامتصاص، ثاني أكسيد الكربون، الألكانات الكحولية الأمينية، عمود الامتصاص.

## Résumé

Le but de ce travail est la simulation de l'absorption de dioxyde de carbone dans une colonne à garnissage par une amine dont la DEEA 2-(di-éthylamine)-éthanol en suite par une autre amine qui est la BDA (1,4 butane-diamine), les résultats de la simulation sont obtenus par un modèle mathématique qui nous permet de calculer les concentrations de CO<sub>2</sub> et de l'amine à la sortie de la colonne.

La simulation a été faite en prenant les caractéristiques et les dimensions d'une colonne d'absorption au sein de département de génie chimique pour des concentrations en BDA et DEEA (1, 2, 3,4) M, (2, 3,4) M respectivement à 303.15 K et 313.15 K où on fait varier le débit de gaz en CO<sub>2</sub> et observer la concentration du CO<sub>2</sub> et l'amine en sortie de la colonne.

Les résultats de la simulation ont montré que la BDA en solution aqueuse est plus performante que la DEEA en termes de taux l'absorption du CO<sub>2</sub>.

Mots clés : Absorption, dioxyde de carbone, alcanolamines.

## Abstract

The purpose of this work is the simulation of the absorption of carbon dioxide in a garnishing column by an amine which is DEEA 2-(di-éthylamine)-ethanol then by another amine which is the BDA (1,4 butane-diamine). The results of the simulation are obtained by a

mathematical model which enables us to calculate the concentrations of CO<sub>2</sub> and the amine at the exit of the column.

The simulation was made by taking the characteristics and dimensions of an absorption within department of chemical engineering for concentrations in BDA and DEEA (1, 2, 3,4) M, (2, 3,4) M respectively to 303.15 K and 313.15 K where we vary the CO<sub>2</sub> gas flow and to observe the concentration of CO<sub>2</sub> and the amine at exit of the column.

The results of simulation showed that the BDA in aqueous solution is more powerful than the DEEA in terms of rate of absorption of CO<sub>2</sub>

Key Words: Absorption, carbon dioxide, alkanolamines.

# *Remerciement*

*Nous adressons nos chaleureux remerciements au Pr. Ratiba DERRICHE et au Pr. Ammar SELATNIA pour nous avoir proposé ce sujet intéressant et pour nous avoir guidé pendant ce travail avec leurs conseils et leurs remarques.*

*Nous remercions plus particulièrement :*

*Pr. Toudert AHMED ZAID de nous avoir fait l'honneur de présider notre jury.*

*Mme Farida MEZIANI et Mme Saliha HADDOUM d'avoir accepté d'être membres du jury.*

*Nous tenons à remercier également le doctorant Fayçal MESSIKAR pour son aide.*

*Enfin, nous remercions tous les enseignants du Département de Génie Chimique.*

# Dédicace

*A ma mère et à mon père*

# SOMMAIRE

|   |           |
|---|-----------|
| <b>INTRODUCTION</b> .....   | <b>1</b>  |
| <b>I. Généralités sur les Alcanolamines</b> .....   | <b>3</b>  |
| <b>I.1 Les groupes d'Alcanolamines</b> .....  | <b>3</b>  |
| <b>I.2.L'absorption de CO<sub>2</sub> par une amine</b> .....                               | <b>4</b>  |
| I.2.1.L'absorption de CO <sub>2</sub> par MEA .....   | 5         |
| I.2.2.L'absorption de CO <sub>2</sub> par la DEA.....                                       | 6         |
| I.2.3.L'absorption de CO <sub>2</sub> par la MDEA.....                                      | 6         |
| I.2.4.COMPARAISON.....  | 7         |
| <b>II COLONNE D'ABSORPTION</b> .....  | <b>9</b>  |
| <b>II.1.Description et fonctionnement de la colonne à garnissage</b> .....                  | <b>9</b>  |
| II. 1. 1. Alimentation liquide .....  | 9         |
| II. 1. 2 Alimentation gaz.....  | 9         |
| II. 1. 3 Contrôle et régulation .....   | 10        |
| <b>II. 2. Caractéristiques du garnissage et de la colonne garnie</b> .....                  | <b>11</b> |
| <b>III. Modélisation et simulation de la colonne d'absorption</b> .....                     | <b>14</b> |
| <b>III.1.Modélisation de la colonne d'absorption de CO<sub>2</sub> par une amine</b> .....  | <b>14</b> |
| <b>III.2.La procédure de simulation de la colonne d'absorption</b> .....                    | <b>18</b> |
| <b>III.3. Simulation de l'absorption de CO<sub>2</sub> par la MEA.....</b>                  | <b>26</b> |
| <b>III.4.Modélisation et simulation de l'absorption de CO<sub>2</sub> par la DEEA</b> ..... | <b>29</b> |
| <b>III.5.Modélisation et simulation de l'absorption de CO<sub>2</sub> par la BDA.....</b>   | <b>35</b> |
| <b>III.6.Résultats et interprétations :</b> .....   | <b>41</b> |
| <b>Références</b> .....   | <b>45</b> |

## Nomenclatures

### Lettres latines

- A : Nombre adimensionnelle
- a : Aire interfaciale ( $\text{m}^2/\text{m}^3$  de lit)
- $a_p$  : surface du grain ( $\text{m}^2$ )
- $C_{A(E)}$  : Concentration du composé A dans la phase gazeuse à l'entrée de la colonne ( $\text{mol}/\text{m}^3$ )
- $C_{A(S)}$  : Concentration du composé A dans la phase gazeuse à la sortie de la colonne ( $\text{mol}/\text{m}^3$ )
- $C_{AG}$  : Concentrations du composé A dans la phase gazeuse ( $\text{mole}/\text{m}^3$ )
- $C_{AGi}$  : Concentrations du composé A à l'interface côté gaz ( $\text{mole}/\text{m}^3$ )
- $C_{ALi}$  : Concentrations du composé A à l'interface côté liquide ( $\text{mole}/\text{m}^3$ )
- $C_{B(E)}$  : Concentration du composé B dans la phase liquide à l'entrée de la colonne ( $\text{mol}/\text{m}^3$ )
- $C_{B(S)}$  : Concentration du composé B dans la phase liquide à la sortie de la colonne ( $\text{mol}/\text{m}^3$ )
- $D_{AG}$  : Coefficient de diffusion du composé A côté gaz ( $\text{m}^2/\text{s}$ )
- $D_{AL}$  : Coefficient de diffusion du composé A dans la phase liquide ( $\text{m}^2/\text{s}$ )
- $D_{AL}$  : Coefficient de diffusion du composé A côté liquide ( $\text{m}^2/\text{s}$ )
- $D_{BL}$  : Coefficient de diffusion du composé B dans la phase liquide ( $\text{m}^2/\text{s}$ )
- $D_{BL}$  : Coefficient de diffusion du composé B dans la phase liquide ( $\text{m}^2/\text{s}$ )
- $D_P$  : Dimension caractéristique du garnissage (m)
- dz : Hauteur d'une tranche de la colonne d'absorption (m)
- E : Facteur d'accélération
- $F_A$  : Le flux de composé A transféré vers la phase liquide ( $\text{mol}/\text{m}^3.\text{s}$ )
- g : Accélération gravitationnelle ( $\text{m}/\text{s}^2$ )
- G, L : Débit volumique de l'air et de la phase liquide ( $\text{m}^3/\text{s}$ )
- H : Constante de Henry ( $\text{Pa}.\text{m}^3/\text{mole}$ )
- $H_a$  : Nombre adimensionnel appelé nombre de Hatta
- $k_{AG}$  : Coefficient de transfert de matière de composé A côté gaz ( $\text{m}/\text{s}$ )
- $k_{AL}$  : Coefficient de transfert de matière de composé A côté liquide ( $\text{m}/\text{s}$ )
- $N_A$  : Flux de matière du composé A transféré dans la phase liquide le cas du transfert de matière par réaction chimique ( $\text{mole de A transféré}/\text{m}^2.\text{s}$ )

$k$  : Constante de vitesse de la réaction (l/mol.s)  
 $r_A$  : Vitesse de la réaction (mol /m<sup>3</sup>.s)  
 $S$  : Section droite de la colonne (m<sup>2</sup>)  
 $T$  : Température (K)  
 $S_p$  : Surface spécifique du garnissage gaz - liquide (m<sup>2</sup>/m<sup>3</sup> de lit)  
 $U_g$  : La vitesse moyenne d'écoulement du flux gazeux (m/s)  
 $U_L$  : La vitesse moyenne d'écoulement du flux gazeux (m/s)  
 $V_p$  : Volume du grain (m<sup>3</sup>)  
 $x$  : Fraction molaire de composé  
 $Z$  : Hauteur de la colonne à garnissage

### **Lettres grecques**

$\zeta_L$  : Rétention liquide  
 $\mu_G$  : Viscosité dynamique du mélange gazeux (kg/m.s)  
 $\mu_L$  : Viscosité dynamique du mélange liquide (kg/m.s)  
 $\rho_G$  : Masse volumique du mélange gazeux (kg/m<sup>3</sup>)  
 $\rho_L$  : Masse volumique du mélange liquide (kg/m<sup>3</sup>)  
 $\delta_G$  : Epaisseur du film cote phase gazeuse (m)  
 $\beta_1, \beta_2$  : Constante d'équilibre  
 $\delta_L$  : Epaisseur du film cote phase liquide (m)  
 $\sigma$  : Tension superficielle relative à la phase liquide (N/m)  
 $\sigma$  : Tension superficielle critique relative au matériau du garnissage (N/m)  
 $\lambda$  : Nombre adimensionnelle  
 $v_A, v_B, v_P$  : Coefficients stœchiométriques

## **Indices**

A : Soluté (CO<sub>2</sub>)  
B : Amine  
G : Phase gazeuse  
L : Phase liquide  
i : Interface  
0 : Initial

## **Symboles**

AMP : Amino-2-Méthyl-1- Propanol  
BDA : 1,4-butanediamine  
  
CO<sub>2</sub> : Dioxyde de Carbone  
DEA : Diéthanolamine  
DEEA : 2-diéthylamino éthanol  
  
DIPA : Diisopropanolamine  
HA : Hexylamine  
MDEA: Méthyldiéthanolamine  
MEA : Monoéthanolamine  
PZ : Pipérazine

## Liste des tableaux

|   |                |
|---|----------------|
| <b>Tableau I.1 : Propriétés physiques de quelques Alcanolamines</b>   | <b>.....4</b>  |
| <b>Tableau III.1 : Amélioration des résultats de la simulation faite par Mr AMRANI concernant l'absorption de CO<sub>2</sub> par la MEA</b> | <b>.....28</b> |
| <b>Tableau III. 2 : Equations de modèle mathématique DEEA</b>   | <b>.....31</b> |
| <b>Tableau III.3 : Résultats de simulation d'absorption de CO<sub>2</sub> par DEEA</b>  | <b>.....34</b> |
| <b>Tableau III.4 : Equations de modèle mathématique BDA</b>   | <b>.....37</b> |
| <b>Tableau III.5 : Résultats de simulation d'absorption de CO<sub>2</sub> par BDA</b>   | <b>.....40</b> |
| <b>Tableau III. 6 : Différence de concentration système DEEA-CO<sub>2</sub></b>   | <b>.....42</b> |
| <b>Tableau III. 7 : Différence de concentration système BDA-CO<sub>2</sub></b>  | <b>.....42</b> |

## Liste des figures

|   |           |
|---|-----------|
| <b>Figure I.1. : Comparaison de la solubilité du CO<sub>2</sub> dans l'eau pure et dans une solution de MEA (2.5 M) .....</b>                           | <b>5</b>  |
| <b>Figure II. 1 : Schéma de la colonne à garnissage .....</b>   | <b>10</b> |
| <b>Figure II.2 : Anneaux Raschig .....</b>  | <b>11</b> |
| <b>Figure III.1 : Bilan de matière sur une tranche élémentaire (dz) .....</b>   | <b>16</b> |
| <b>Figure III .2 : Discrétisation de la colonne d'absorption .....</b>  | <b>20</b> |
| <b>Figure III.3 : procédure de calcul de coefficient d'accélération (E) et le flux (F<sub>A</sub>) .....</b>  | <b>23</b> |
| <b>Figure III.4 : Organigramme du programme de calcul des concentrations du CO<sub>2</sub> et de L'amine en Sortie de la colonne d'absorption .....</b> | <b>24</b> |

# **INTRODUCTION**

# INTRODUCTION

## INTRODUCTION

L'absorption d'un gaz dans un liquide se rencontre dans de nombreux procédés des industries chimiques, agroalimentaires, pétrolières et biochimiques. Le paramètre clé intervenant dans la mise au point de ses procédés ainsi que dans le dimensionnement des réacteurs est la solubilité de ses différents gaz dans les liquides et leurs capacités à réagir avec des réactifs dissous dans ces liquides.

Les colonnes à garnissage restent les plus utilisées pour la séparation des gaz acides tel que  $\text{CO}_2$ , le  $\text{H}_2\text{S}$  du gaz naturel et autres gaz industriels parce qu'elles présentent une grande aire interfaciale.

Toutes substances présentant une réactivité avec le  $\text{CO}_2$  pourrait être utilisées pour séparer le  $\text{CO}_2$  d'un mélange gazeux. Pour des raisons économiques les réactifs les plus appropriés sont les Alcanolamines (amines primaires secondaires tertiaires).

De ce fait dans ce présent travail nous nous sommes intéressés à la modélisation et à la simulation de l'absorption de  $\text{CO}_2$  par deux solutions aqueuses d'Alcanolamines dont la BDA (amine primaire) et la DEEA (amine secondaire), opérant à deux températures 303,15 K 313,15 K, mais avant ça nous procédons à l'amélioration des résultats simulés faites par S. AMRANI sur une la monoéthanolamine (MEA) à fin de valider le modèle mathématique [1].

Le modèle mathématique proposé permet d'estimer les concentrations du  $\text{CO}_2$  et de l'amine en sortie de la colonne à garnissage, après avoir résolu un système d'équations différentielles.

Nous allons voir de plus près l'influence de différents paramètres à savoir les concentrations de l'amine et de  $\text{CO}_2$ , à l'entrée de la colonne et la température sur l'absorption de  $\text{CO}_2$  par les solutions aqueuses d'alcanolamines.

# CHAPITRE I

**Absorption du CO<sub>2</sub> par une amine**

### I. Généralités sur les Alcanolamines

Parmi les solvants chimiques, les solutions d'Alcanolamines sont les plus utilisées dans les procédés d'absorption des gaz acides. Le gaz réagit chimiquement avec l'absorbant liquide pour former des complexes plus ou moins faiblement liés. La structure moléculaire des Alcanolamines contient au moins un groupement hydroxyle (-OH) et un groupement amine (-N); le groupement hydroxyle augmente la solubilité dans l'eau et diminue la pression de vapeur de la solution aqueuse et le groupement amine fournit l'alcalinité nécessaire en solution aqueuse pour assurer l'absorption des gaz acides tel le CO<sub>2</sub> [2].

#### I.1 Les groupes d'Alcanolamines

Les amines peuvent être classées en trois groupes :

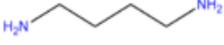
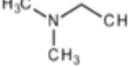
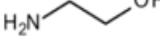
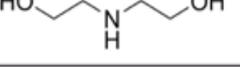
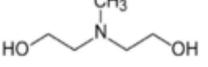
- **Primaires (R<sub>1</sub>NH<sub>2</sub>):** ce sont des amines très réactives avec les gaz-acides et permettent des séparations de grande pureté (ex: la Monoéthanolamine « MEA » , l'Hexylamine « HA » et 1,4-butanediamine « BDA »).

- **Secondaires (R<sub>1</sub>R<sub>2</sub>NH) :** elles sont moins réactives que les amines primaires et ne sont donc à utiliser que pour des objectifs moins exigeants en termes de pureté (ex: la Diéthanolamine « DEA » et la Diisopropanolamine « DIPA »).

- **Tertiaires (R<sub>1</sub>R<sub>2</sub>R<sub>3</sub>N) :** ces amines sont encore moins réactives que les amines secondaires mais leur capacité d'absorption est plus grande (ex: la Méthyldiéthanolamine « MDEA » et la Triéthanolamine « TEA » 2-(diethylamino)-ethanol « DEEA »).

Dans le tableau I.1 nous donnons quelques propriétés d'amines

**Tableau I.1 : Propriétés physiques de quelques Alcanolamines [3]**

| Alcanolamines                  | Formule         | Structure  | M (g/mol)                  | Teb à 1 atm (°C) |
|--------------------------------|-----------------|--|----------------------------|------------------|
| 1,4-Butanediamine<br>BDA       | $C_4H_{12}N_2$  |   | 88.1515                    | 145              |
| N,N-Diethylmethylamine<br>DEEA | $C_4H_{11}NO$   |   | 890.00 kg/m <sup>3</sup>   | 136              |
| 2-Aminoethanol<br>MEA          | $C_2H_7NO$      |   | 75.11 g/mol                | 171              |
| Hexylamine<br>HA               | $C_6H_{15}N$    |   | 101.19 g·mol <sup>-1</sup> | 132,8            |
| DiEthanolAmine<br>DEA          | $C_4H_{11}NO_2$ |   | 105.14 g/mol               | 105,4            |
| Méthyl diéthanolamine<br>MDEA  | $C_6H_{15}NO_3$ |  | 119,16                     | 119,6            |

Avec l'utilisation d'un solvant chimique à base d'amine, il y a deux caractéristiques principales à prendre en compte [4]:

- La cinétique de la réaction d'absorption du CO<sub>2</sub> : les amines primaires sont plus réactives que les amines secondaires, elles-mêmes sont plus réactives que les amines tertiaires. La vitesse d'absorption du CO<sub>2</sub> influera sur le dimensionnement de la colonne d'absorption et donc sur le coût d'investissement du procédé de d'absorption.

- La solubilité du CO<sub>2</sub> dans le solvant : une amine réactive avec le CO<sub>2</sub> permettra d'avoir une très bonne solubilité du CO<sub>2</sub> mais sera plus difficilement régénérable.

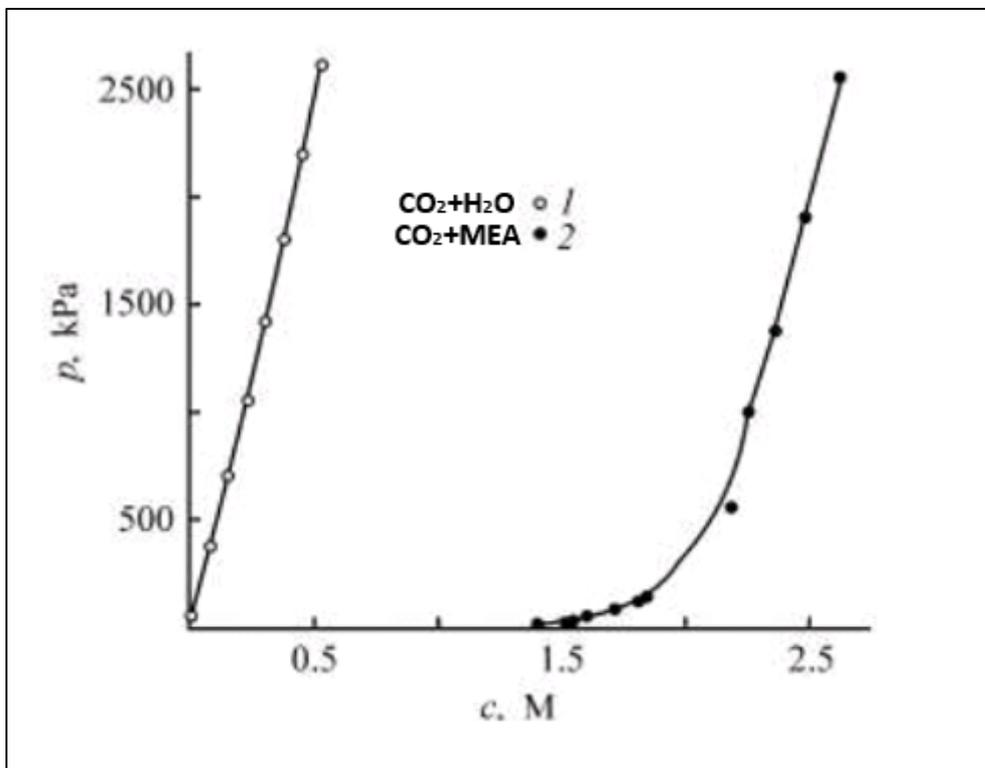
### 1.2.1. L'absorption de CO<sub>2</sub> par une amine

Dans les procédés industriels d'absorption de CO<sub>2</sub>, la MEA, DEA et MDEA sont les solvants chimiques les plus utilisés. La solubilité du CO<sub>2</sub> dans les solutions aqueuses d'Alcanolamines a fait l'objet de plusieurs études expérimentales rapportées dans le master de A. BENREDOUANE [5].

1.2.1. L'absorption de CO<sub>2</sub> par MEA

La monoéthanolamine était considérée pour longtemps comme le solvant par excellence pour l'absorption du CO<sub>2</sub> issu de la combustion du gaz naturel. De nos jours, les solutions de MEA sont remplacées par des solvants plus efficaces mais restent préférables dans le cas où le gaz à épurer est pauvre en CO<sub>2</sub> (des concentrations en CO<sub>2</sub> faibles) et lorsqu'on cherche une absorption poussée.

Les principaux avantages de la MEA qui justifient son utilisation massive sont sa grande réactivité, son faible coût et sa faible capacité d'absorption pour les hydrocarbures. L'efficacité de cette amine en tant qu'absorbant de gaz acides est illustrée par la figure 1 dans laquelle la solubilité de CO<sub>2</sub> dans une solution aqueuse de monoéthanolamine est comparée avec la solubilité de ce même gaz dans l'eau pure comme le montre la figure I.1.



**Figure I.1. : Comparaison de la solubilité du CO<sub>2</sub> dans l'eau pure et dans une solution de MEA (2.5 M) [6], [7].**

On constate que la présence de l'amine dans la solution aqueuse modifie remarquablement l'allure de l'isotherme de solubilité du gaz. Dans le cas de l'eau pure, l'isotherme est une courbe le long de laquelle la pression augmente fortement avec l'augmentation de la concentration de CO<sub>2</sub> et qui commence par l'origine c'est-à-dire la concentration nulle. Dans la

## CHAPITRE I : Absorption du CO<sub>2</sub> par une amine

solution aqueuse d'amine, on peut distinguer deux portions sur l'isotherme de solubilité du gaz acide. Quand le rapport molaire du gaz et de l'amine reste inférieur à l'unité, la pression augmente légèrement avec la concentration du gaz dans la solution car l'amine est protonée et la forme moléculaire du CO<sub>2</sub> est convertie en une forme ionique. Puisque les concentrations d'équilibre pour les ions sont atteintes, la courbe change brusquement car une augmentation supplémentaire dans la concentration du gaz n'est pas accompagnée d'une réaction chimique [8].

Les inconvénients de la MEA sont :

- Son instabilité pour les températures élevées ce qui induit une corrosion des équipements ;
- La formation de carbamates ce qui nécessite une énergie supplémentaire pour la régénération ;
- L'enthalpie de réaction avec le CO<sub>2</sub> élevée (30% de plus comparée à la DEA) ;
- Perte de l'amine par évaporation due à sa pression de vapeur élevée.

### 1.2.2.L'absorption de CO<sub>2</sub> par la DEA

Les solutions de DEA ont été utilisées pour le traitement des gaz contenant de grandes quantités de COS et CS<sub>2</sub> en plus de H<sub>2</sub>S et CO<sub>2</sub>. La DEA a tous les avantages de la MEA, plus encore, elle est thermiquement stable donc moins agressive pour les équipements et forme moins de carbamates qu'une amine primaire. Une autre caractéristique spécifique importante de la DEA est sa grande capacité d'absorption, à titre d'exemple, une solution à 25 ou 30% massique en amine peut absorber de 0.7 à 1.0 mole de CO<sub>2</sub> par mole de DEA [8]. Sa faible pression de vapeur et de ce fait les pertes par évaporation négligeables la rend recommandable en tant qu'absorbant pour les faibles pressions partielles de CO<sub>2</sub>. Son inconvénient majeur est la nécessité d'une distillation sous vide pour sa régénération [9].

### 1.2.3.L'absorption de CO<sub>2</sub> par la MDEA

Malgré son coût élevé comparée à la MEA et la DEA et sa faible réactivité avec le CO<sub>2</sub>, la MDEA a quelques caractéristiques spécifiques qui, non seulement compensent ces inconvénients, mais la rendent économiquement plus rentable que les amines primaires et secondaires dans les procédés de traitement des gaz [8].

La MDEA est utilisée surtout pour sa capacité sélective d'absorber le H<sub>2</sub>S dans un

## CHAPITRE I : Absorption du CO<sub>2</sub> par une amine

mélange avec le CO<sub>2</sub>. Pour le CO<sub>2</sub>, sa réaction avec la MDEA nécessite un intermédiaire comme source de protons pour la formation des ions hydrocarbonates. Les avantages de la MDEA par rapport à la MEA et la DEA sont sa faible volatilité ce qui évite les pertes par évaporation lors de la régénération, sa faible enthalpie de réaction [10] et sa régénération nécessite moins d'énergie que les autres amines. Cette économie d'énergie lors de la régénération est favorisée par le fait que la molécule de la MDEA n'a pas d'atomes d'hydrogène liés directement à l'azote. Ainsi, la réaction avec le CO<sub>2</sub> ne forme pas de carbamates qui, lors de leur décomposition, nécessitent une énergie supplémentaire comme est le cas pour la MEA et la DEA [11] [12] [13].

### 1.2.4.COMPARAISON

D'après ces études, il a été prouvé que pour les mêmes concentrations d'amines dans les solutions et pour la même température, la solubilité de CO<sub>2</sub> est généralement supérieure dans les solutions de MEA que celles de DEA et MDEA. Cependant, pour les pressions partielles moyennes ou élevées de CO<sub>2</sub>, la solubilité est meilleure dans les solutions de MDEA, cette amine a l'avantage d'avoir une grande capacité d'absorption (1 mole de MDEA absorbe 1 mole de CO<sub>2</sub>) parce qu'elle ne forme pas un carbamate.

La pression partielle de CO<sub>2</sub> à partir de laquelle sa solubilité commence à être meilleure dans les solutions de MDEA que celle de MEA dépend fortement des conditions expérimentales . A titre d'exemple, pour une solution d'amine à 30 % massique et 313.15 K, cette pression partielle de CO<sub>2</sub> est de 15 kPa et environ 220 kPa à 353.15 K [7].

Aussi beaucoup de chercheurs se sont intéressés au mélange d'amines pour tirer profit des avantages de chaque types d'amine ,le travail que nous aborderons dans notre projets de fin d'études [14].

# CHAPITRE II

## **Description de la colonne d'absorption**

## II COLONNE D'ABSORPTION

### II.1. Description et fonctionnement de la colonne à garnissage

La colonne d'absorption que nous avons utilisé à une hauteur de 160 cm, un diamètre de 7,5 cm et est entièrement fabriquée en verre ; elle est constituée de deux tronçons superposés dont la hauteur est de 80 cm chacun ; chaque tronçon contient un garnissage de 63 cm de hauteur, donc la hauteur totale du garnissage en vrac sera de 126 cm, le garnissage est constitué d'anneaux Raschig en PVC dont le diamètre de sphère équivalente est 10 mm [1].

La colonne fonctionne en continu et en discontinu et peut être alimentée en deux points, qui se trouvent en tête de chaque tronçon, ce qui nous donne le choix d'utiliser toute la hauteur de la colonne, ou sa moitié.

La circulation du liquide à travers toute la colonne est assurée à l'aide d'une pompe qui refoule des débits variant entre 5 et environ 260 l/h.

L'échantillonnage est assuré grâce au robinet de prélèvement placé avant les réservoirs de récupérations.

Les débits des différents fluides sont contrôlés par des débitmètres.

#### II. 1. 1. Alimentation liquide

Quand on veut travailler par un seul tronçon de la colonne, on ferme la vanne (II) et on ouvre la vanne (I). Pour l'utilisation de deux tronçons, on ferme la vanne (I) et on ouvre la vanne (II).

Aussi, pour avoir un fonctionnement en circuit fermé, on ferme la vanne (IV) et on ouvre la vanne (III), et on inverse pour avoir un circuit ouvert.

#### II. 1. 2 Alimentation gaz

Il existe un compresseur qui assure un débit constant d'air et le CO<sub>2</sub> provient des bouteilles remplies de 99.99% de CO<sub>2</sub> muni d'un manodétendeur qui control le débit.

## CHAPITRE II : Description de la colonne d'absorption

### II. 1. 3 Contrôle et régulation

Le réglage doit procurer un fonctionnement stable de la colonne pour cela, on a des débitmètres permettant la régulation manuelle [15].

- 1-Débitmètre du CO<sub>2</sub>.
- 2-Débitmètre du liquide.
- 3-Circuit d'alimentation liquide
- 4-Colonne.
- 5-Garnissage Raschig.
- 6-Pompe Hydraulique.
- 7-Bac tampon.
- 8-Réservoirs d'alimentation.
- 9-Réservoirs de récupération.
- 10-Bouteille de CO<sub>2</sub>
- 11-Compresseur d'air
- 12-Entré du gaz.
- 13-Entrée du liquide.
- 14-Robinet de prélèvement.
- 15-Compteur à gaz.
- (I), (II), (III), (IV) : Vannes.

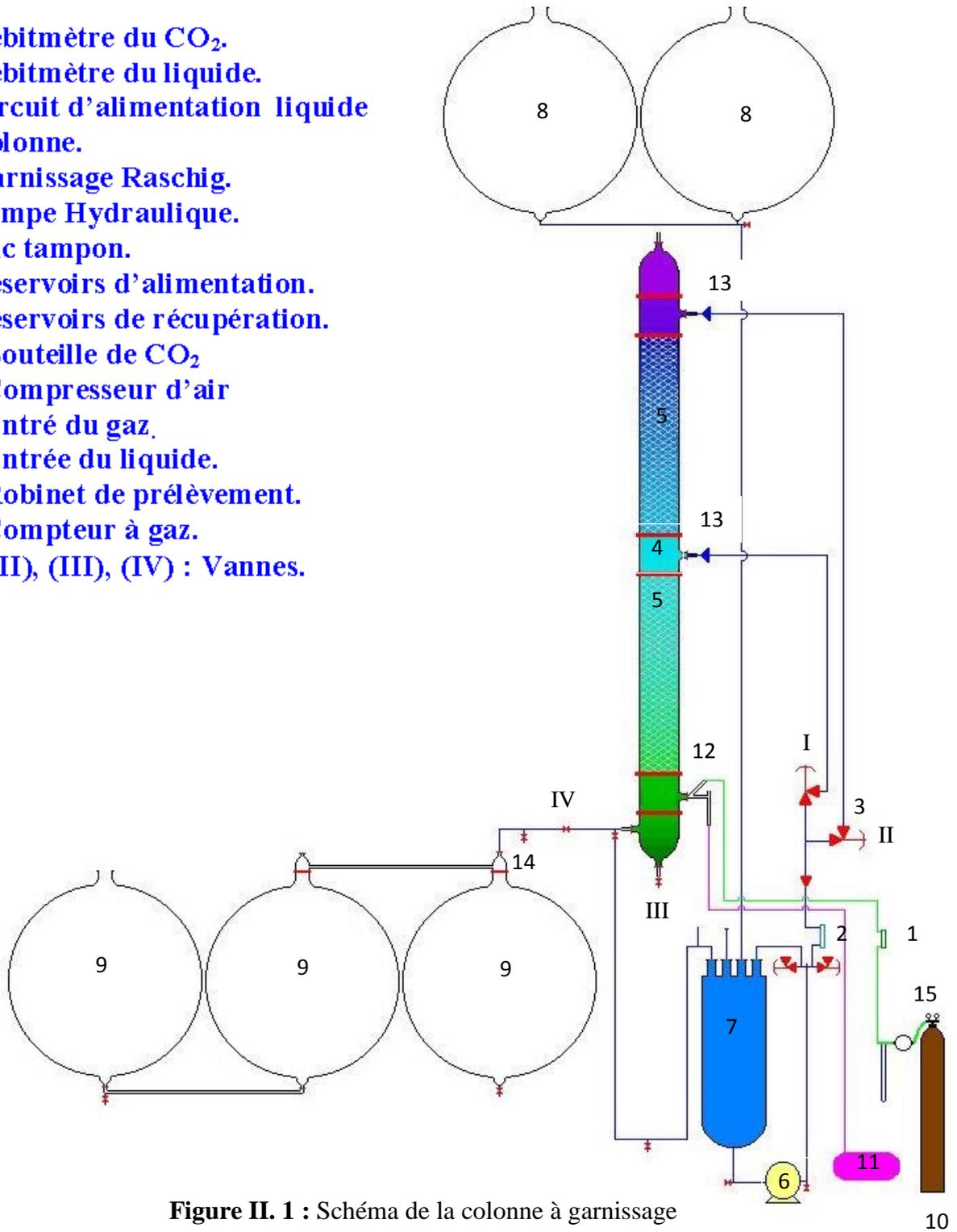


Figure II. 1 : Schéma de la colonne à garnissage

II. 2. Caractéristiques du garnissage et de la colonne garnie

Les anneaux de garnissage (Raschig en verre) possèdent la géométrie suivante :

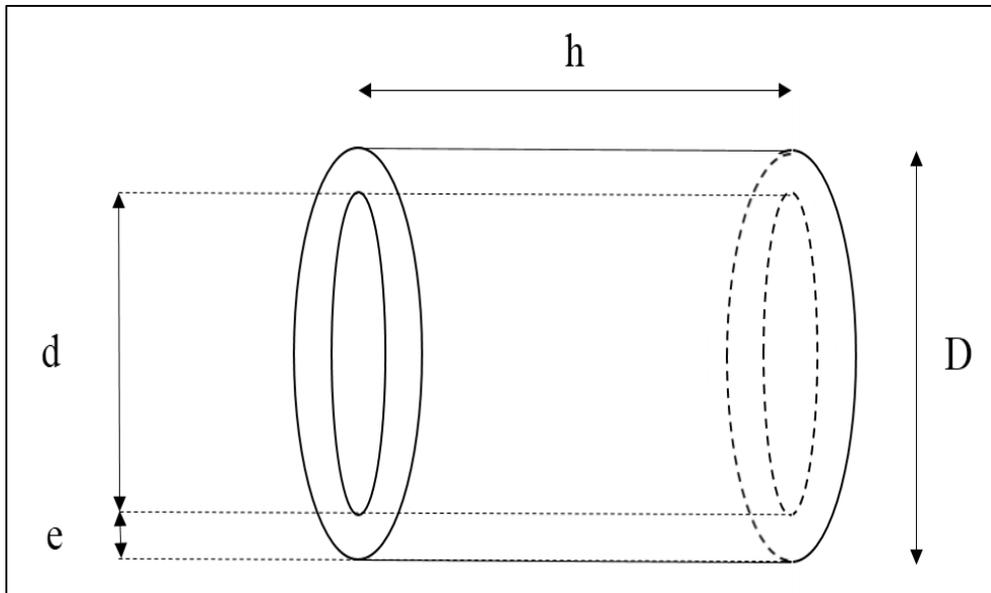


Figure II.2 : Anneaux Raschig

Avec :

$$h = 10.5 \text{ mm} \quad (\text{La hauteur})$$

$$D = 10.5 \text{ mm} \quad (\text{Diamètre extérieur})$$

$$d = 7.3 \text{ mm} \quad (\text{diamètre intérieur})$$

$$e = 1.6 \text{ mm} \quad (\text{L'épaisseur})$$

Les propriétés de garnissage calculés par [1] sont :

$$A_p = 469.11 \text{ (m}^2/\text{m}^3\text{)}$$

$$D_p = 9.64 \cdot 10^{-3} \text{ m}$$

$$\varepsilon_g = 0.48$$

$$\varepsilon_{\text{colonne}} = 0.67$$

$$S_p = 676.63 \text{ mm}^2$$

$$V_p = 469.49 \text{ mm}^3$$

$A_p$  : surface du grain (m<sup>2</sup>)

$D_p$  : Dimension caractéristique du garnissage (m)

## CHAPITRE II : Description de la colonne d'absorption

$\varepsilon_g$  : Porosité de grain

$\varepsilon_{colonne}$ : Porosité de la colonne

$S_p$  : Surface spécifique du garnissage gaz - liquide ( $m^2/m^3$  de lit)

$V_p$  : Volume du grain ( $m^3$ )

Les autres propriétés sont calculées à l'aide des équations données dans le tableau (III.2)

# CHAPITRE III

**Modélisation et simulation de la colonne d'absorption**

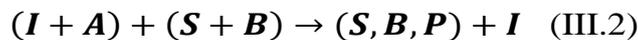
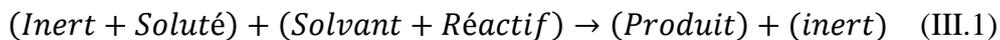
### III. Modélisation et simulation de la colonne d'absorption

Dans cette étude, on va estimer les concentrations du CO<sub>2</sub>, et de l'amine en sortie de la colonne à garnissage. Les calculs se feront grâce à l'élaboration d'un modèle mathématique où on lui fournit les paramètres à l'entrée de la colonne et il nous donne les paramètres à la sortie dont les concentrations de CO<sub>2</sub> et de l'amine

#### III.1. Modélisation de la colonne d'absorption de CO<sub>2</sub> par une amine

Une absorption de CO<sub>2</sub> accompagnée d'une réaction chimique modifie le profil des concentrations à proximité de l'interface et de ce fait affecte le flux de transfert vers la phase où se déroule la réaction.

La réaction à étudier étant la suivante :



**A : CO<sub>2</sub>**

**B : Amine**

**S : H<sub>2</sub>O**

**I : air**

**P : Produit**

Afin de simplifier la résolution de l'équation du modèle, les hypothèses suivantes ont été proposées :

- Toutes les propriétés physiques du gaz et du liquide sont constantes le long de la colonne et au cours du temps.
- L'écoulement est en régime permanent.
- Le processus est isotherme.
- La dispersion axiale est négligeable dans la phase gazeuse et dans la phase liquide.
- **Réaction rapide entre le CO<sub>2</sub> et amine ( $Ha > 5$ ).**

Dans ces conditions, les équations du modèle se réduisent à l'écriture des bilans de matière partiels dans chaque phase, auxquelles s'ajoutent les relations traduisant les conditions aux limites et d'équilibre.

Puisque, nous nous intéressons à l'évolution de la concentration du CO<sub>2</sub> dans amine le long de la colonne d'absorption, nous avons effectué le bilan de matière sur le

« CO<sub>2</sub> » dans la phase gazeuse et dans la phase liquide sur un élément (dz) et le bilan de matière sur l'amine en phase liquide (figure III.1).

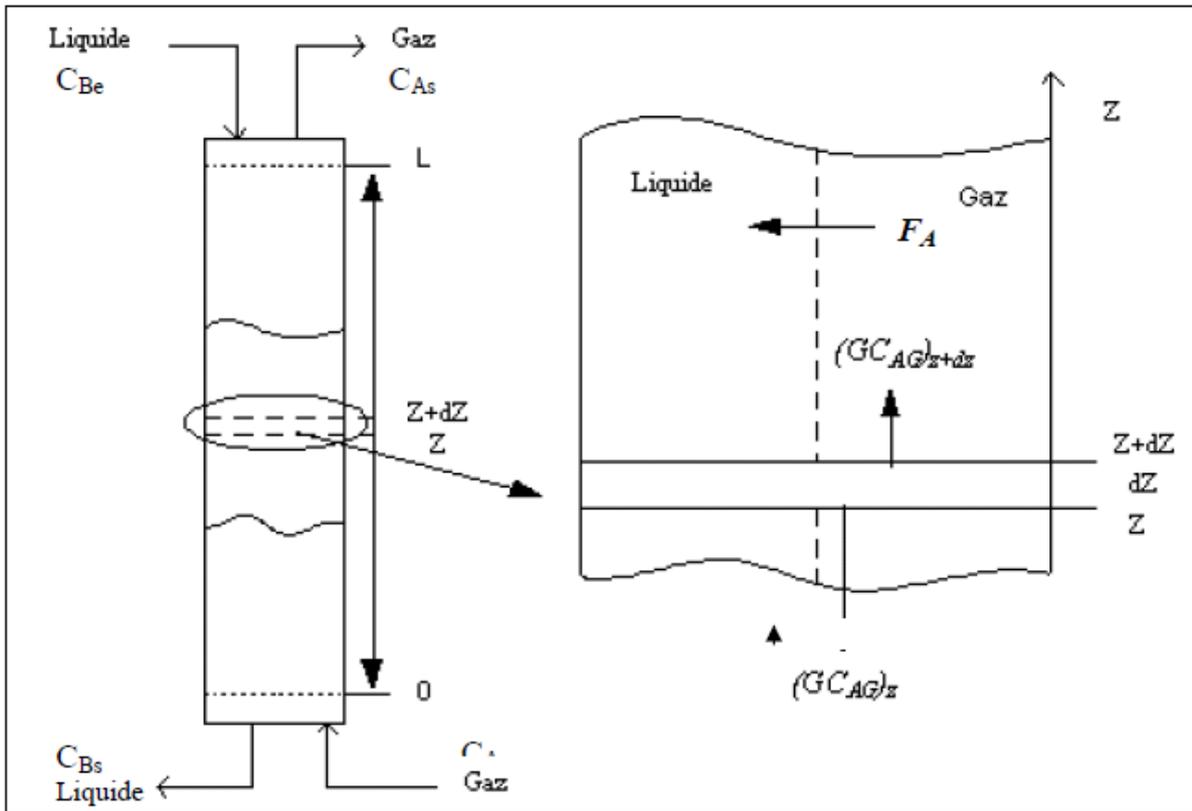


Figure III.1 : Bilan de matière sur une tranche élémentaire (dz).

En régime établi on peut écrire

- Bilan de matière sur le CO<sub>2</sub> (A) dans la phase gazeuse :

$$\left[ \begin{array}{l} \text{Quantité de soluté} \\ \text{à l'entrée (z)} \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{l} \text{quantité de soluté} \\ \text{en sortie (z + dz)} \end{array} \right] + \left[ \begin{array}{l} \text{quantité de soluté transféré} \\ \text{de la phase gazeuse} \\ \text{vers la phase liquide} \end{array} \right]$$

Soit le bilan de matière sur une tranche  $dz$  dans la phase gazeuse :

$$(G C_{AG})_z = (G C_{AG})_{z+dz} + F_A \cdot S \cdot dz \quad (III.3)$$

Or :

$$(G C_{AG})_{z+dz} = (G C_{AG})_z + \frac{d}{dz}(G C_{AG})dz \quad (III.4)$$

$$\text{Alors : } \frac{G}{S} \frac{dC_{AG}}{dz} + F_A = 0 \quad (III.5)$$

Soit  $U_g = \frac{G}{S}$  la vitesse moyenne d'écoulement, alors l'équation (III.5) s'écrit :

$$U_g \frac{dC_{AG}}{dz} + F_A = 0 \quad (III.6)$$

- **Bilan de matière sur le CO<sub>2</sub> dans le liquide :**

$$(L C_{AL})_z = (L C_{AL})_{z+dz} - F_A \cdot S \cdot dz - [k \cdot C_{AL} \cdot C_{BL}] \cdot \zeta_L S dz \quad (III.7)$$

Avec:  $\zeta_L$ : Rétenion liquide.

Or :

$$(L C_{AL})_{z+dz} = (L C_{AL})_z + \frac{d}{dz}(L C_{AL})dz \quad (III.8)$$

$$\frac{d}{dz}(L C_{AL})dz + F_A \cdot S \cdot dz - [k \cdot C_{AL} \cdot C_{BL}] \cdot \zeta_L S dz = 0 \quad (III.9)$$

$$\text{D'où } \frac{L}{S} \frac{dC_{AL}}{dz} + F_A - [k \cdot C_{AL} \cdot C_{BL}] \cdot \zeta_L = 0 \quad (III.10)$$

Soit  $U_L = \frac{L}{S}$  la vitesse moyenne d'écoulement du flux liquide alors équation (III.10) devient :

$$U_L \frac{dC_{AL}}{dz} + F_A - [k \cdot C_{AL} \cdot C_{BL}] \cdot \zeta_L = 0 \quad (III.11)$$

• **Bilan de l'amine (B) dans la phase liquide :**

$$(L C_{BL})_z = (L C_{BL})_{z+dz} - [k \cdot C_{AL} \cdot C_{BL}] \cdot \zeta_L S dz \quad (III.12)$$

Or :

$$(L C_{BL})_{z+dz} = (L C_{BL})_z + \frac{d}{dz} (L C_{BL}) dz \quad (III.13)$$

$$\frac{d}{dz} (L C_{BL}) dz - [k \cdot C_{AL} \cdot C_{BL}] \cdot \zeta_L S dz = 0 \quad (III.14)$$

$$D'où : \frac{L}{S} \frac{dC_{BL}}{dz} - [k \cdot C_{AL} \cdot C_{BL}] \cdot \zeta_L = 0 \quad (III.15)$$

$$U_L \frac{dC_{BL}}{dz} - [k \cdot C_{AL} \cdot C_{BL}] \cdot \zeta_L = 0 \quad (III.16)$$

D'une manière générale, la réaction entre le CO<sub>2</sub> et l'amine est considérée comme réaction rapide (Il n'y a pas d'accumulation du CO<sub>2</sub> dans la phase liquide) alors on peut écrire pour une tranche dz :

$$\frac{dC_{AL}}{dz} = 0 \quad (III.17)$$

En tenant compte de l'équation (III.17), l'équations (III.11) deviennent :

$$F_A = [k \cdot C_{AL} \cdot C_{BL}] \cdot \zeta_L \quad (III.18)$$

C'est-à-dire : la quantité du CO<sub>2</sub> transférée dans la phase liquide réagit totalement avec l'amine.

Les bilans de matière sur le CO<sub>2</sub> et l'amine dans les phases liquide et gazeuse se réduisent aux équations suivantes :

**Bilan sur le CO<sub>2</sub> (A) dans la phase gazeuse :**

$$U_g \frac{dC_{AG}}{dz} + F_A = 0 \quad (III.19)$$

**Bilan de l'amine (B) dans la phase liquide :**

$$U_L \frac{dC_{BL}}{dz} - F_A = 0 \quad (III.20)$$

• **Expression de  $F_A$  :**

$$F_A = [N_A] \cdot a \quad (III.21)$$

$$[N_A] = E \cdot [N'_A] = E \cdot k_{AL} (C_{ALi} - C_{AL}) \quad (III.22)$$

Avec :  $C_{AL} \approx 0$

Donc :  $F_A = a \cdot E \cdot k_{AL} \cdot C_{ALi} \quad (III.23)$

En admettant que l'équilibre est établi à l'interface gaz – liquide, et pour des faibles concentrations du CO<sub>2</sub> (A), nous pouvons écrire :

$$C_{AGi} = H \cdot C_{ALi} \quad (III.24)$$

$$[N_A] = k_{AG} (C_{AG} - H C_{ALi}) = E k_{AL} C_{ALi} \quad (III.25)$$

D'où

$$C_{ALi} = \frac{k_{AG} C_{AG}}{E k_{AL} + H \cdot k_{AG}} \quad (III.26)$$

### III.2. La procédure de simulation de la colonne d'absorption

Pour pouvoir déterminer les concentrations du CO<sub>2</sub> et de l'amine à la sortie de la colonne, nous avons conçu un programme qui permet la résolution numérique du système d'équations (III.19), (III.20).

Pour cela nous avons divisé la colonne en n tranches de hauteur dz (Figure III.2), et pour chaque tranche nous avons calculé le facteur d'accélération E, ainsi que le flux transférer du CO<sub>2</sub> (FA). Connaissant le flux transférer du CO<sub>2</sub> (FA) et en intégrant le système d'équation (III.19),(III.20), nous calculerons les concentrations de l'amine et du CO<sub>2</sub> dans différentes tranches dz et ainsi de suite jusqu' à atteindre la n ème tranche.

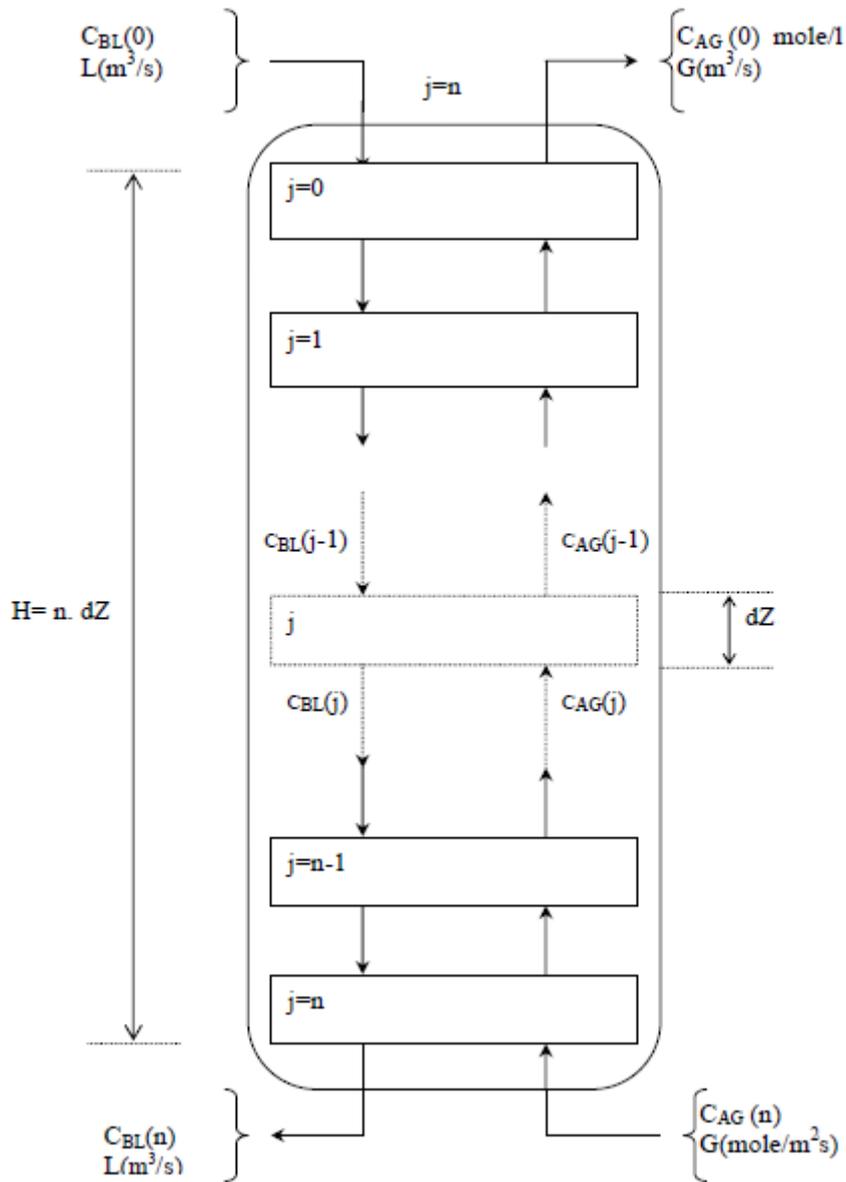


Figure III .2 : Discrétisation de la colonne d'absorption

**La procédure de calcul de flux  $F_A$  transférer de la phase gaz vers la phase liquide sur une tranche  $dz$ , (réacteur parfaitement agité) est la suivante :**

- Introduire ses paramètres ( $T$ ,  $x$  ou  $C_{\text{amine}(e)}$ ,  $C_{\text{CO}_2e}$ ,  $C_{\text{CO}_2\text{estimé}}$ ,  $G$ ,  $L$ )

$T$  : Température au quelle on veut travailler (K)

$X$  : Fraction molaire de l'amine

$C_{\text{amine}(e)}$  : Concentration de l'amine à l'entrée (mol/l)

$C_{\text{CO}_2e}$  : Concentration de  $\text{CO}_2$  à l'entrée (mol/l)

$C_{\text{CO}_2\text{estimé}}$  : Concentration de  $\text{CO}_2$  à la sortie (valeur estimé) (mol/l)

$G$  : Débit de l'air ( $\text{m}^3/\text{s}$ )

$L$  : Débit de liquide ( $\text{m}^3/\text{s}$ )

- Ses facteurs d'entrées vont permettre de calculer les propriétés ( $a, k$ ,  $k_{AG}$ ,  $k_{AL}$ ,  $D_{AL}$ ,  $D_{BL}$ , et  $He$ )
- calculer le nombre de Hatta ( $Ha$ ) :

$$Ha = \frac{\sqrt{k_1 C_{BL} D_{AL}}}{k_L} \quad (III.27)$$

- Nous estimons une valeur de  $E$  en faisant par exemple  $E(i) = Ha$  et nous calculons  $C_{ALi}$  et

$N_2$ :

$$C_{ALi} = \frac{k_{AG} C_{AG}}{E(i) k_{AL} + He \cdot k_{AG}} \quad (III.28)$$

Et :

$$N_2 = \frac{v_A D_{BL} C_{BL}}{v_B D_{AL} C_{ALi}} \quad (III.29)$$

- Nous estimons  $E(i+1)$  à partir de l'expression de Kishinevskii :

$$E(i+1) = 1 + \frac{Ha}{A} [1 - \exp(-0,65Ha\sqrt{A})] \quad (III.30)$$

Avec :

$$A = \frac{Ha}{N_2} + \exp\left[\frac{0,68}{Ha} - \frac{0,45}{N_2} Ha\right] \quad (III.31)$$

- Si la valeur de  $E(i+1)$  est différente de  $E(i)$ , nous poursuivons le calcul itérative de

manière itérative jusqu'à ce que  $E(n+1) \approx E(n)$ . La valeur de  $E(n)$  est alors prise comme valeur de  $E$ .

- Le flux de NA du composé (A) transféré de la phase gazeuse vers la phase liquide peut se calculer de l'expression suivante :

$$[N_A] = E_{(Final)} k_{AL} C_{ALi(Final)} \quad (III.32)$$

Le flux est calculé à partir de l'expression suivante:

$$F_A = a \cdot E_{(Final)} \cdot k_{AL} \cdot C_{ALi(Final)} \quad (III.33)$$

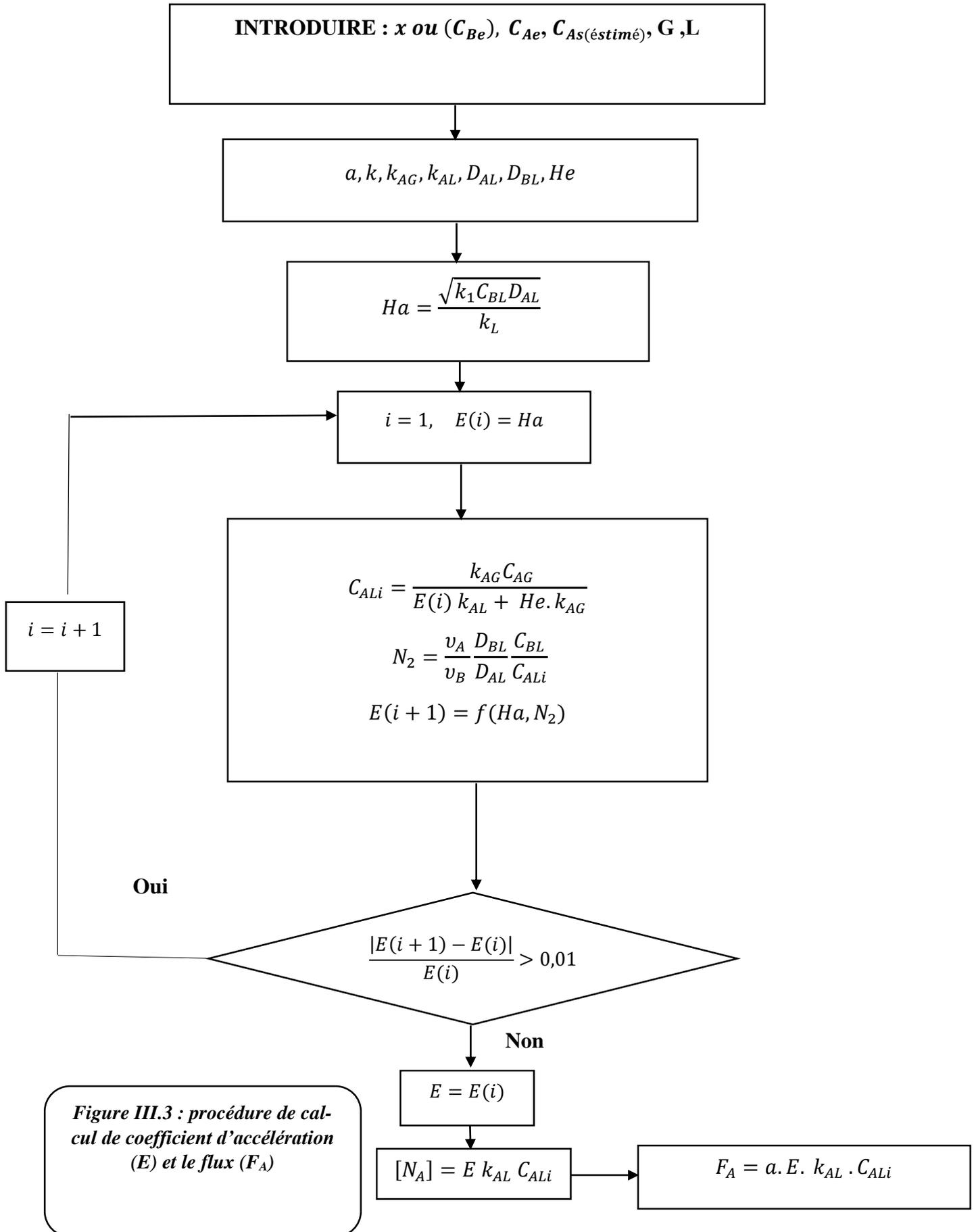
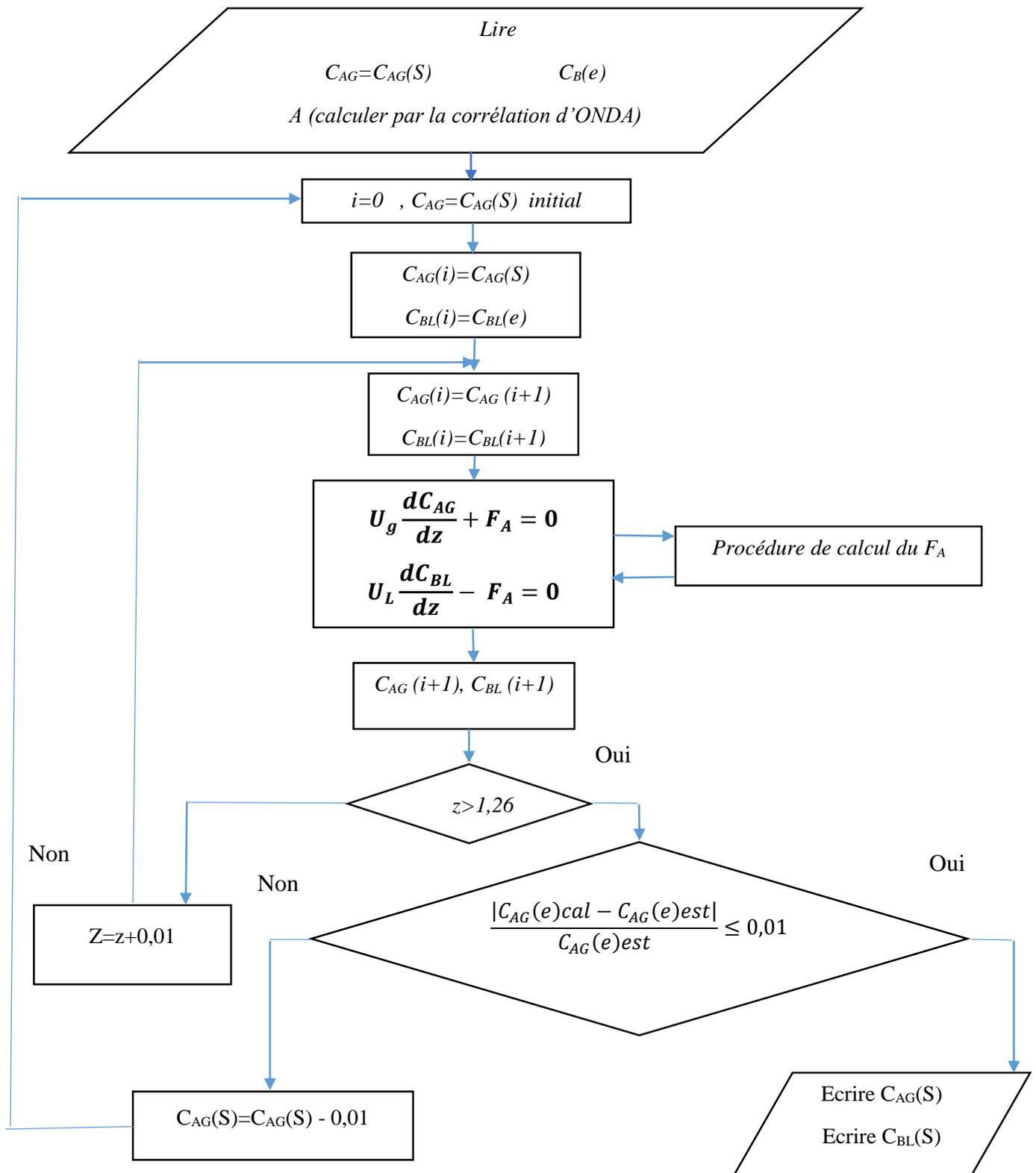


Figure III.3 : procédure de calcul de coefficient d'accélération (E) et le flux (F<sub>A</sub>)



**Figure III.4 : Organigramme du programme de calcul des concentrations du CO2 et de l'amine en Sortie de la colonne d'absorption.**

### Chapitre III : Modélisation et simulation de la colonne d'absorption

Cet organigramme est la continuité d'algorithme principale Avec les concentrations initiales du CO<sub>2</sub> et de l'amine en tête de la colonne  $Z(i) = 0$ , Nous calculons les concentrations du CO<sub>2</sub> et de l'amine en sortie de la tranche d'indice (i) par les équations des bilans, en utilisant le flux calculés dans la sous-boucle de la figure III.3.

- Le calcul se poursuit jusqu' à atteindre la tranche d'indice n.

- Nous vérifions si la différence entre la concentration du CO<sub>2</sub> à l'entrée de la colonne CA(e) calculée par le programme avec CA (e) la concentration de CO<sub>2</sub> donné par l'utilisateur à l'entrée de la colonne d'absorption. Si cette différence est inférieure à 0.01 le programme s'arrête, sinon nous allons reprendre le calcul : en choisissant une autre valeur de la concentration du CO<sub>2</sub> en sortie de la colonne d'absorption.

- En fin du programme, nous afficherons les valeurs des concentrations du CO<sub>2</sub> et de l'amine en sortie de la colonne ( $C_A(s)$  ,  $C_B(s)$ ).

**L'estimation des concentrations de CO<sub>2</sub> en sortie de la colonne se fait comme le montre cette démarche :**

On a :

$$F_A = a \cdot E \cdot k_{AL} \cdot C_{ALi}$$

Pour une réaction rapide :  $E = Ha = \frac{\sqrt{kC_{BLE}D_{AL}}}{k_L} \quad *$

Avec :

$$C_{ALi} = \frac{k_{AG}C_{AG}}{E(i)k_{AL} + H \cdot k_{AG}} **$$

En remplaçant (\*) et (\*\*) dans L'expression de F on obtient :

$$F_A = \frac{a\sqrt{kC_{BLE}D_{AL}} k_{AG}C_{AG}}{\sqrt{kC_{BLE}D_{AL}} + H \cdot k_{AG}}$$

D'autre part le bilan de CO<sub>2</sub> en phase gaz a donné l'expression suivante :

$$U_g \frac{dC_{AG}}{dz} + F_A = 0$$

$$\frac{dC_{AG}}{dz} = \frac{-F_A}{U_g}$$

$$\frac{dC_{AG}}{dz} = \frac{-1}{U_g} \frac{a\sqrt{kC_{BLE}D_{AL}} k_{AG}C_{AG}}{\sqrt{kC_{BLE}D_{AL}} + H \cdot k_{AG}}$$

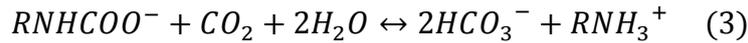
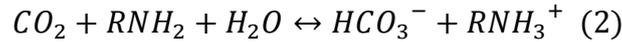
$$\int_{C_{AG}(e)}^{C_{AG}(s)} \frac{dC_{AG}}{C_{AG}} = \frac{-1}{U_g} \frac{a\sqrt{kC_{BLE}D_{AL}} k_{AG}}{\sqrt{kC_{BLE}D_{AL}} + H \cdot k_{AG}} \int_0^z dz$$

$$C_{AG}(s) = C_{AG}(e) e^{\left[ \frac{-za\sqrt{kC_{BLE}D_{AL}} k_{AG}}{\sqrt{kC_{BLE}D_{AL}} + H \cdot k_{AG}} \right]}$$

III.3. Simulation de l'absorption de CO<sub>2</sub> par la MEA :

**Système MEA+CO<sub>2</sub> [16]**

Le CO<sub>2</sub> réagit avec MEA comme suit :



La réaction directe du CO<sub>2</sub> avec l'eau, suivie par la dissociation de l'acide carbonique présentée à une vitesse de réaction négligeable sauf à des valeurs de PH peu élevé.

Pour le système CO<sub>2</sub>-MEA, la vitesse de formation de bicarbonate est grande selon Astarita [16] .

La réaction entre le CO<sub>2</sub> et la MEA est supposée irréversible et du premier ordre. Toute fois la réaction (1) est la plus lente donc, nous pouvons la considérer comme la réaction principale.



**La vitesse de la réaction**

$$r = k [CO_2] [RNH_2]$$

$$r = k C_{AL} C_{BL}$$

avec :

$$\text{Log}_{10} k' = 10,99 - \frac{2152}{T} \quad (\text{l/mol.s}) [17]$$

**T : température (K) ,k=k'.1000**

**k : de vitesse de la réaction (l/mol.s)**

### Chapitre III : Modélisation et simulation de la colonne d'absorption

Dans cette partie, on essaie d'améliorer les calculs de concentrations faite dans une ancienne thèse réalisé aux département par AMRANI [1] , les résultats sont illustrés dans le tableau III.1

| Essai | T (°C) | D <sub>Air</sub> 10 <sup>-3</sup> m <sup>3</sup> /s | L 10 <sup>-3</sup> m <sup>3</sup> /s | G <sub>CO2</sub> 10 <sup>-4</sup> m <sup>3</sup> /s | C <sub>Be</sub> mol/l | C <sub>Bs</sub> (cal) mol/l | C <sub>Ae</sub> 10 <sup>-3</sup> mol/l | C <sub>As</sub> 10 <sup>-3</sup> (Cal) mol/l | C <sub>As</sub> 10 <sup>-3</sup> (estimé) mol/l | C <sub>As</sub> 10 <sup>-3</sup> (exp) mol/l [1] |
|-------|--------|---|--------------------------------------|---|-----------------------|-----------------------------|--|--|---|--|
| 1     | 313,15 | 1,652   | 0,0151                               | 1,4287  | #                     | #                           | #                                      | #  | #   | #  |
| 2     | 313,15 | 1,652   | 0,0151                               | 2,7273  | 0,5                   | 0,36                        | 5,79                                   | 5,3  | 5,772   | 4,26   |
| 3     | 313,15 | 1,652   | 0,0151                               | 4   | 0,5                   | 0,34                        | 7,97                                   | 7,5  | 7,946   | 6,48   |
| 4     | 313,15 | 1,652   | 0,0151                               | 5   | 0,5                   | 0,33                        | 9,5                                    | 9,0  | 9,473   | 8,08   |
| 5     | 313,15 | 1,652   | 0,0151                               | 1,4287  | 1                     | 0,83                        | 3,25                                   | 2,5  | 3,234   | 1,15   |
| 6     | 313,15 | 1,652   | 0,0151                               | 2,7273  | 1                     | 0,79                        | 5,79                                   | 5,0  | 5,764   | 3,06   |
| 7     | 313,15 | 1,652   | 0,0151                               | 4   | 1                     | 0,76                        | 7,97                                   | 7,2  | 7,936   | 5,10   |
| 8     | 313,15 | 1,652   | 0,0151                               | 5   | 1                     | 0,74                        | 9,5                                    | 8,7  | 9,461   | 6,73   |
| 9     | 313,15 | 1,652   | 0,021                                | 1,4287  | 0,5                   | 0,42                        | 3,25                                   | 2,8  | 3,239   | 1,3  |
| 10    | 313,15 | 1,652   | 0,021                                | 2,7273  | 0,5                   | 0,40                        | 5,79                                   | 5,3  | 5,772   | 3,73   |
| 11    | 313,15 | 1,652   | 0,021                                | 4   | 0,5                   | 0,38                        | 7,97                                   | 7,5  | 7,946   | 5,89   |
| 12    | 313,15 | 1,652   | 0,021                                | 5   | 0,5                   | 0,38                        | 9,5                                    | 9,0  | 9,473   | 7,47   |
| 13    | 298,15 | 1,652   | 0,021                                | 1,4287  | 1                     | 0,87                        | 3,25                                   | 2,5  | 3,242   | 1,82   |
| 14    | 298,15 | 1,652   | 0,021                                | 2,7273  | 1                     | 0,84                        | 5,79                                   | 5,0  | 5,777   | 3,93   |
| 15    | 298,15 | 1,652   | 0,021                                | 4   | 1                     | 0,82                        | 7,97                                   | 7,1  | 7,954   | 5,99   |
| 16    | 298,15 | 1,652   | 0,021                                | 5   | 1                     | 0,81                        | 9,5                                    | 8,7  | 9,481   | 7,50   |

**Tableau III.1 : Résultats de la simulation des essais faits par AMRANI concernant l'absorption de CO<sub>2</sub> par la MEA**

### Chapitre III : Modélisation et simulation de la colonne d'absorption

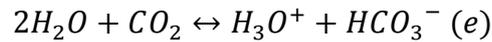
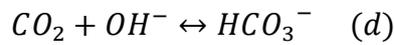
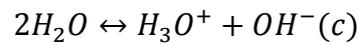
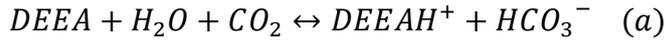
- AMRANI [1] a fixé l'erreur à 6% au lieu de 1% car il a eu un problème de convergence par contre on est arrivé à régler ce problème et même on a fixé une erreur jusqu'à 0.1%, de ce fait les concentrations de CO<sub>2</sub> à la sortie de la colonne calculées par notre programme sont plus proches que les concentrations de CO<sub>2</sub> expérimentales de AMRANI et cela par rapport aux valeurs estimées à la sortie par le calcul d'intégral.
- En plus, le pas utilisé dans le calcul de flux dans la colonne est dix fois plus petit que celui de la thèse citée précédemment, ce qui donne une bonne simulation de ce qui se passe à l'intérieur de la colonne.
- En fin, notre programme n'a pas besoin d'une valeur proche de celle de la sortie (concentration de gaz à la sortie) pour tourner (histoire de minimiser les itérations et le temps de calcul). mais plus encore, il oriente l'utilisateur concernant la concentration de gaz à la sortie en affichant des commentaires pour ne pas introduire des concentrations à l'entrée qui donnent des concentrations négatives à la sortie

### III.4. Modélisation et simulation de l'absorption de CO<sub>2</sub> par la DEEA

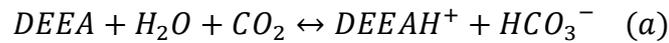
#### Système DEEA+CO<sub>2</sub>

La DEEA est une amine tertiaire dont la formule est C<sub>4</sub>H<sub>11</sub>NO et de masse molaire de 89 g/mol, la DEEA est issue à partir des ressources renouvelables, plusieurs chercheurs ont travaillé sur cet amine on site à titre d'exemple Xu Zhiching.

La DEEA réagit avec le CO<sub>2</sub> comme suite :



La réaction entre CO<sub>2</sub> +DEEA est irréversible et de premier ordre toute fois la réaction (a) est la plus lente donc nous pouvons la concéder comme la réaction principale



**La vitesse et la constante de vitesse de la réaction [18]**

$$r_1 = k_1[DEEA][CO_2] \quad (III.1)$$

$$k_1 = 7.808 \times 10^{10} \exp\left[\frac{-6166.8}{T}\right] \quad (III.2)$$

Les équations introduites dans le simulateur dérivants les propriétés physico-chimiques de DEEA sont présentées dans le tableau III.2 suivant :

|                          | Equation   |
|--------------------------|--|
| Garnissage et section    | $S = 0.0044 \text{ (m}^2\text{)}$ $A_p = 469.11 \text{ (m}^2\text{/m}^3\text{)}$ $D_p = 9.64 \cdot 10^{-3} \text{ (m)}$ $\text{Débit}_{air} = G = 1.652 \cdot 10^{-3} \text{ (m}^3\text{/s)}$  |
| Les vitesses des fluides | $U_L = \frac{L}{S}$  |
|                          | $U_G = \frac{G}{S}$  |
| Constante d'Henry        | $H_{DEEA} = (-5.2 \cdot 10^5 T^2 + 3 \cdot 10^8 T - 5.4 \cdot 10^{10})x_{DEEA}^4 + (2 \cdot 10^5 T^2 - 1.3 \cdot 10^{10} T + 2 \cdot 10^{10})x_{DEEA}^3 + (-2.6 \cdot 10^3 T^2 + 1.7 \cdot 10^5 T - 2.7 \cdot 10^6)x_{DEEA}^2 + (1.2 \cdot 10^3 T^2 - 7.8 \cdot 10^4 T + 1.2 \cdot 10^6)x_{DEEA} + (-1.6 T^2 + 10^5 T - 1.6 \cdot 10^6) \text{ [5]}$ |
| Constante de vitesses    | $k_{2,DEEA} = 7,808 \cdot 10^{10} \exp\left(\frac{-6166.8}{T}\right) \text{ [18]}$   |
| Densité                  | $\rho_{DEEA} = \left[0,5260 + \frac{-2920,0}{T} (-0,01838x_{DEEA}) + \frac{-1,5151 \times 10^4}{T^2}\right] \times \exp\left[\frac{307,54}{T} + 37,2233(-0,01838x_{DEEA})\right] \text{ [19]}$   |
| Viscosité                | $\mu_{DEEA} = \left[1 + 4486 \frac{(2,4061x_{DEEA})}{T} + 1,6338 \times 10^6 \frac{(2,4061x_{DEEA})^2}{T^2}\right] \times \exp\left[\frac{-4324,48}{T} + \frac{1,31 \times 10^6}{T^2} - 1,1926(2,4061x_{DEEA})^2\right] \text{ [19]}$  |

|                            |  |
|----------------------------|--|
|                            | $\mu_{eau} = -0.0117 T + 4.3595 \text{ [5]}$   |
| Viscosité infinie          | $\mu_{DEEA} = \left[ 1 + 4486 \frac{(2,4061 \times 0.0001)}{T} + 1,6338 \times 10^6 \frac{(2,4061 \times 0.0001)^2}{T^2} \right] \times \exp \left[ \frac{-4324,48}{T} + \frac{1,31 \times 10^6}{T^2} - 1,1926(2,4061 \times 0.0001)^2 \right] \text{ [19]}$   |
| Tension superficielle      | $\gamma_{eau} = 235.8 \cdot 10^{-3} \left( \frac{647.15 - T}{647.15} \right)^{1.256} \left( 1 - 0.625 \left( \frac{647.15 - T}{647.15} \right) \right) \text{ [20]}$   |
|                            | $\gamma_{tension\ superficielle\ critique\ relative\ au\ matériau\ du\ garnissage} = 1.21$   |
|                            | $\gamma_{DEEA} = \gamma_{eau} \text{ manque de données}$   |
| Aire spécifique            | $a = A_p \left( 1 - \exp \left( -1.5 \left( \frac{\gamma_{garnissage}}{\gamma_{DEEA}} \right)^{0.75} \left( \frac{(U_L^2 \rho_{DEEA})}{\gamma_{DEEA} A_p} \right)^{0.2} \left( \frac{(U_L^2 A_p)}{9.81} \right)^{-0.05} \left( \frac{(U_L \rho_{DEEA})}{A_p \mu_{DEEA} 10^{-3}} \right)^{0.1} \right) \right)$ |
| Coefficients de diffusions | $D_{CO_2-H_2O} = 2.35 \cdot 10^{-6} \exp \left( -\frac{2119}{T} \right) \text{ [21]}$  |
|                            | $D_{CO_2-L} = D_{CO_2-H_2O} \left( \frac{\mu_{eau}}{\mu_{DEEA}} \right)^{0.8} \text{ [21]}$  |
|                            | $D_{zero-DEEA} = 7.4 \cdot 10^{-8} \left( \frac{117.19^{0.5} T}{\mu_{DEEAinfinie} 160.2^{0.6}} \right) \text{ [21]}$   |

|                           |  |
|---------------------------|--|
|                           | $D_{DEEA-L} = \left( \frac{D_{zero-DEEA} 10^{-4}}{\left( \frac{\mu_{DEEA}}{\mu_{eau}} \right)^{0.5}} \right) \quad [21]$   |
| Coefficients de transfert | $k_L = A_P D_{CO2-L} (0.0051 (A_P D_p)^{0.4} \left( \frac{U_L \rho_{DEEA}}{A_P \mu_{DEEA} 10^{-3}} \right)^{\frac{3}{4}} \left( \frac{U_L^2 A_p}{9.81} \right)^{-\frac{1}{3}} \left( \frac{\mu_{DEEA} 10^{-3}}{\rho_{DEEA} D_{CO2-L}} \right)^{1/2}$ |
|                           | $k_G = 5.81 10^{-2} (U_G)^{0.7} \quad [1]$   |

**TABLEAU III 2 : Equations de modèle mathématique DEEA**

Chapitre III : Modélisation et simulation de la colonne d'absorption

Résultats de simulation d'absorption de CO<sub>2</sub> par DEEA sont donnés dans le tableau III.3 :

| Essai | T (K)  | D <sub>Air</sub> 10 <sup>-3</sup><br>(m <sup>3</sup> /s) | L <sub>Liq</sub> 10 <sup>-3</sup><br>(m <sup>3</sup> /s) | G <sub>CO<sub>2</sub></sub> 10 <sup>-4</sup><br>(m <sup>3</sup> /s) | x <sub>DEEA</sub><br>(mol/mol) | C <sub>DEEAe</sub><br>(mol/l) | C <sub>DEEA<sub>s</sub>(Cal)</sub><br>(mol/l) | C <sub>CO<sub>2e</sub></sub> 10 <sup>-3</sup><br>(mol/l) | C <sub>CO<sub>2s</sub>(estimé)</sub> 10 <sup>-3</sup><br>(mol/l) | C <sub>CO<sub>2s</sub>(Cal)</sub> 10 <sup>-3</sup><br>(mol/l) |
|-------|--------|--|--|---|--------------------------------|-------------------------------|---|--|--|---|
| 1     | 303,15 | 1,652  | 0,021  | 1,4287  | 0,035                          | 2                             | 1,9990  | 3,25   | 3,24   | 3,249   |
| 2     | 303,15 | 1,652  | 0,021  | 2,7273  | 0,035                          | 2                             | 1,9983  | 5,79   | 5,787  | 5,789   |
| 3     | 303,15 | 1,652  | 0,021  | 4   | 0,035                          | 2                             | 1,9976  | 7,97   | 7,962  | 7,969   |
| 4     | 303,15 | 1,652  | 0,021  | 5   | 0,035                          | 2                             | 1,9972  | 9,5  | 9,461  | 9,459   |
| 5     | 303,15 | 1,652  | 0,021  | 1,4287  | 0,0512                         | 3                             | 2,9986  | 3,25   | 3,242  | 3,249   |
| 6     | 303,15 | 1,652  | 0,021  | 2,7273  | 0,0512                         | 3                             | 2,9976  | 5,79   | 5,779  | 5,789   |
| 7     | 303,15 | 1,652  | 0,021  | 4   | 0,0512                         | 3                             | 2,9966  | 7,97   | 7,959  | 7,969   |
| 8     | 303,15 | 1,652  | 0,021  | 5   | 0,0512                         | 3                             | 2,9960  | 9,5  | 9,480  | 9,499   |
| 9     | 303,15 | 1,652  | 0,021  | 1,4287  | 0,067                          | 4                             | 3,9982  | 3,25   | 3,242  | 3,249   |
| 10    | 303,15 | 1,652  | 0,021  | 2,7273  | 0,067                          | 4                             | 3,9969  | 5,79   | 5,773  | 5,789   |
| 11    | 303,15 | 1,652  | 0,021  | 4   | 0,067                          | 4                             | 3,9957  | 7,97   | 7,954  | 7,969   |
| 12    | 303,15 | 1,652  | 0,021  | 5   | 0,067                          | 4                             | 3,9948  | 9,5  | 9,507  | 9,499   |
| 13    | 313,15 | 1,652  | 0,021  | 1,4287  | 0,035                          | 2                             | 1,9983  | 3,25   | 3,238  | 3,249   |
| 14    | 313,15 | 1,652  | 0,021  | 2,7273  | 0,035                          | 2                             | 1,9969  | 5,79   | 5,778  | 5,789   |
| 15    | 313,15 | 1,652  | 0,021  | 4   | 0,035                          | 2                             | 1,9958  | 7,97   | 7,951  | 7,969   |
| 16    | 313,15 | 1,652  | 0,021  | 5   | 0,035                          | 2                             | 9,4990  | 9,5  | 9,483  | 9,499   |
| 17    | 313,15 | 1,652  | 0,021  | 1,4287  | 0,0512                         | 3                             | 2,9977  | 3,25   | 3,231  | 3,240   |
| 18    | 313,15 | 1,652  | 0,021  | 2,7273  | 0,0512                         | 3                             | 2,9959  | 5,79   | 5,772  | 5,789   |
| 19    | 313,15 | 1,652  | 0,021  | 4   | 0,0512                         | 3                             | 2,9944  | 7,97   | 7,958  | 7,969   |
| 20    | 313,15 | 1,652  | 0,021  | 5   | 0,0512                         | 3                             | 2,9934  | 9,5  | 9,482  | 9,499   |
| 21    | 313,15 | 1,652  | 0,021  | 1,4287  | 0,067                          | 4                             | 3,9975  | 3,25   | 3,221  | 3,249   |

### Chapitre III : Modélisation et simulation de la colonne d'absorption

|    |        |       |       |        |       |   |        |      |       |       |
|----|--------|-------|-------|--------|-------|---|--------|------|-------|-------|
| 22 | 313,15 | 1,652 | 0,021 | 2,7273 | 0,067 | 4 | 3,9955 | 5,79 | 5,778 | 5,789 |
| 23 | 313,15 | 1,652 | 0,021 | 4      | 0,067 | 4 | 3,9938 | 7,97 | 7,957 | 7,969 |
| 24 | 313,15 | 1,652 | 0,021 | 5      | 0,067 | 4 | 3,9926 | 9,5  | 9,471 | 9,499 |

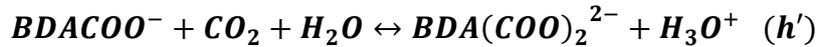
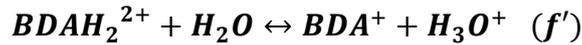
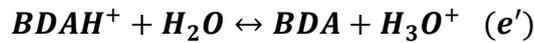
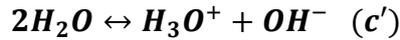
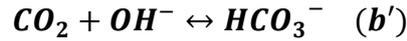
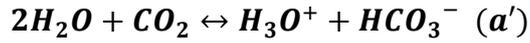
**Tableau III.3. Résultats de simulation d'absorption de CO2 par DEEA**

III.5. Modélisation et simulation de l'absorption de CO<sub>2</sub> par la BDA

**Système BDA+CO<sub>2</sub> :**

La BDA est une amine primaire dont la formule est C<sub>4</sub>H<sub>12</sub>N<sub>2</sub> et de masse molaire de 88.15 g /mol, Xu Zhiching a beaucoup travaillé sur cet amine .

**La BDA réagit avec le CO<sub>2</sub> comme suite :**



$$r_2 = k_2[BDA][CO_2] \quad (III.34)$$

$$k_2 = \left[ 1.246 \times 10^5 \exp\left(\frac{-521.69}{T}\right) [BDA] + 4.859 \times 10^{12} \exp\left(\frac{-7772.1}{T}\right) [H_2O] \right] \quad (III.35)$$

[21]

Les équations introduites dans le simulateur dérivants les propriétés physico-chimiques de DEEA sont présentées dans le tableau III.4 :

|                          | Equation   |
|--------------------------|--|
| Garnissage et section    | $S = 0.0044 \text{ (m}^2\text{)}$ $A_p = 469.11 \text{ (m}^2\text{/m}^3\text{)}$ $D_p = 9.64 \cdot 10^{-3} \text{ (m)}$ $\text{Débit}_{\text{air}} = G = 1.652 \cdot 10^{-3} \text{ (m}^3\text{/s)}$   |
| Les vitesses des fluides | $U_L = \frac{L}{S}$  |
|                          | $U_G = \frac{G}{S}$  |
| Constante d'Henry        | $H_{BDA} = (-1.8 \cdot 10^3 T^2 + 1.3 \cdot 10^6 T - 2.3 \cdot 10^7) x_{BDA}^3 + (5.5 \cdot 10^2 T^2 - 3.9 \cdot 10^4 T + 7 \cdot 10^7) x_{BDA}^2 + (-48.6 T^2 + 3.3 \cdot 10^4 T - 6 \cdot 10^5) x_{BDA} + (0.8 T^2 - 5.7 \cdot 10^2 T + 10^5) \quad [5]$ |
| Concentration de l'eau   | $C_{H_2O} = \left( \frac{C_{BDA}}{x_{BDA}} \right) - C_{BDA}$  |
| Constante de vitesses    | $k_{2,BDA} = \{1,2 \cdot 10^5 \exp\left(\frac{-521.69}{T}\right) [BDA] + 4,9 \cdot 10^{12} \exp\left(\frac{-7772.1}{T}\right) [H_2O]\} \quad [18]$   |

|                            |   |
|----------------------------|---|
| Densité                    | $\rho_{BDA} = \left[ 0,5635 + \frac{64,004}{T} (x_{BDA}) + \frac{-1,4958 \times 10^4}{T^2} \right] \times \exp \left[ \frac{273,87}{T} - 0,65421(x_{BDA}) \right] [19]$   |
| Viscosité                  | $\mu_{BDA} = \left[ 1 + 1290 \frac{(x_{BDA})}{T} + 2,0806 \times 10^7 \frac{(x_{BDA})^2}{T^2} \right] \times \exp \left[ \frac{-4011,71}{T} + \frac{1,238 \times 10^6}{T^2} + -17,178(x_{BDA})^2 \right] [19]$  |
|                            | $\mu_{eau} = -0.0117 T + 4.3595 [5]$  |
| Viscosité infinie          | $\mu_{BDA} = \left[ 1 + 1290 \frac{(0,0001)}{T} + 2,0806 \times 10^7 \frac{(0,0001)^2}{T^2} \right] \times \exp \left[ \frac{-4011,71}{T} + \frac{1,238 \times 10^6}{T^2} + -17,178(0,0001)^2 \right] [19]$   |
| Tension superficielle      | $\gamma_{eau} = 235.8 \cdot 10^{-3} \left( \frac{647.15 - T}{647.15} \right)^{1.256} \left( 1 - 0.625 \left( \frac{647.15 - T}{647.15} \right) \right) [20]$  |
|                            | $\gamma_{tension\ superficielle\ critique\ relative\ au\ matériau\ du\ garnissage} = 1.21$  |
|                            | $\gamma_{BDA} = \gamma_{eau} \text{ manque de données}$   |
| Aire spécifique            | $a = A_p \left( 1 - \exp \left( -1.5 \left( \frac{\gamma_{garnissage}}{\gamma_{BDA}} \right)^{0.75} \left( \frac{(U_L^2 \rho_{BDA})}{\gamma_{BDA} A_p} \right)^{0.2} \left( \frac{(U_L^2 A_p)}{9.81} \right)^{-0.05} \left( \frac{(U_L \rho_{BDA})}{A_p \mu_{BDA} 10^{-3}} \right)^{0.1} \right) \right)$ |
| Coefficients de diffusions | $D_{CO_2-H_2O} = 2.35 \cdot 10^{-6} \exp \left( -\frac{2119}{T} \right) [21]$   |

|                           |  |
|---------------------------|--|
|                           | $D_{CO_2-L} = D_{CO_2-H_2O} \left( \frac{\mu_{eau}}{\mu_{BDA}} \right)^{0.8} \quad [21]$   |
|                           | $D_{zero-BDA} = 7.4 \cdot 10^{-8} \left( \frac{88.1515^{0.5T}}{\mu_{BDAinfinie} 117.2^{0.6}} \right) \quad [21]$   |
|                           | $D_{BDA-L} = \frac{D_{zero-BDA} 10^{-4}}{(\mu_{BDA})^{0.5} (\mu_{eau})} \quad [21]$  |
| Coefficients de transfert | $k_L = A_P D_{CO_2-L} (0.0051 (A_P D_p)^{0.4} \left( \frac{U_L \rho_{BDA}}{A_P \mu_{BDA} 10^{-3}} \right)^{\frac{3}{4}} \left( \frac{U_L^2 A_p}{9.81} \right)^{-\frac{1}{3}} \left( \frac{\mu_{BDA} 10^{-3}}{\rho_{BDA} D_{CO_2-L}} \right)^{1/2}$ |
|                           | $k_G = 5.81 \cdot 10^{-2} (U_G)^{0.7} \quad [1]$   |

**Tableau III.4 : Equations de modèle mathématique BDA**

On refait la même démarche pour calculer les concentrations de CO<sub>2</sub> et le BDA en sortie de la colonne les résultats de simulation sont donnés dans le tableau III.5 :

| Essai | T (°C) | D <sub>Air</sub> 10 <sup>-3</sup> m <sup>3</sup> /s | L 10 <sup>-3</sup> m <sup>3</sup> /s | G <sub>CO2</sub> 10 <sup>-4</sup> m <sup>3</sup> /s | x     | C <sub>Be</sub> mol/l | C <sub>Bs</sub> (cal) mol/l | C <sub>Ae</sub> 10 <sup>-3</sup> mol/l | C <sub>CO2s(estimé)</sub> 10 <sup>-3</sup> (mol/l) | C <sub>As</sub> 10 <sup>-3</sup> (Cal) mol/l |
|-------|--------|---|--------------------------------------|---|-------|-----------------------|-----------------------------|--|--|--|
| 1     | 303,15 | 1,652   | 0,0151                               | 1,4287  | 0.017 | 1                     | 0.9943                      | 3,25                                   | 3.229  | 3.233  |
| 2     | 303,15 | 1,652   | 0,0151                               | 2,7273  | 0.017 | 1                     | 0.9899                      | 5,79                                   | 5.758  | 5.767  |
| 3     | 303,15 | 1,652   | 0,0151                               | 4   | 0.017 | 1                     | 0.9861                      | 7,97                                   | 7.937  | 7.946  |
| 4     | 303,15 | 1,652   | 0,0151                               | 5   | 0.017 | 1                     | 0.9853                      | 9,5                                    | 9.463  | 9.478  |
| 5     | 303,15 | 1,652   | 0,0151                               | 1,4287  | 0.035 | 2                     | 1.983                       | 3,25                                   | 3.123  | 3.138  |
| 6     | 303,15 | 1,652   | 0,0151                               | 2,7273  | 0.035 | 2                     | 1.9697                      | 5,79                                   | 5.542  | 5.609  |
| 7     | 303,15 | 1,652   | 0,0151                               | 4   | 0.035 | 2                     | 1.9583                      | 7,97                                   | 7.738  | 7.741  |
| 8     | 303,15 | 1,652   | 0,0151                               | 5   | 0.035 | 2                     | 1.9503                      | 9,5                                    | 9.237  | 9.245  |
| 9     | 303,15 | 1,652   | 0,021                                | 1,4287  | 0.017 | 1                     | 0.9955                      | 3,25                                   | 3.222  | 3.229  |
| 10    | 303,15 | 1,652   | 0,021                                | 2,7273  | 0.017 | 1                     | 0.992                       | 5,79                                   | 5.742  | 5.759  |
| 11    | 303,15 | 1,652   | 0,021                                | 4   | 0.017 | 1                     | 0.989                       | 7,97                                   | 7.919  | 7.936  |
| 12    | 303,15 | 1,652   | 0,021                                | 5   | 0.017 | 1                     | 0.9869                      | 9,5                                    | 9.451  | 9.466  |
| 13    | 313,15 | 1,652   | 0,021                                | 1,4287  | 0.035 | 2                     | 1.9866                      | 3,25                                   | 3.114  | 3.124  |
| 14    | 313,15 | 1,652   | 0,021                                | 2,7273  | 0.035 | 2                     | 1.976                       | 5,79                                   | 5.559  | 5.585  |
| 15    | 313,15 | 1,652   | 0,021                                | 4   | 0.035 | 2                     | 1.967                       | 7,97                                   | 7.693  | 7.71   |
| 16    | 313,15 | 1,652   | 0,021                                | 5   | 0.035 | 2                     | 1.9606                      | 9,5                                    | 9.183  | 9.2  |
| 17    | 313,15 | 1,652   | 0,0151                               | 1,4287  | 0.052 | 3                     | 2.9683                      | 3,25                                   | 3.010  | 3.014  |

Chapitre III : Modélisation et simulation de la colonne d'absorption

|           |        |       |        |        |       |   |        |      |       |       |
|-----------|--------|-------|--------|--------|-------|---|--------|------|-------|-------|
| <b>18</b> | 313,15 | 1,652 | 0,0151 | 2,7273 | 0.052 | 3 | 2.9434 | 5,79 | 5.372 | 5.402 |
| <b>19</b> | 313,15 | 1,652 | 0,0151 | 4      | 0.052 | 3 | 2.922  | 7,97 | 7.458 | 7.475 |
| <b>20</b> | 313,15 | 1,652 | 0,0151 | 5      | 0.052 | 3 | 2.907  | 9,5  | 8.921 | 8.941 |
| <b>21</b> | 313,15 | 1,652 | 0,0151 | 1,4287 | 0.07  | 4 | 3.952  | 3,25 | 2.684 | 2.877 |
| <b>22</b> | 313,15 | 1,652 | 0,0151 | 2,7273 | 0.07  | 4 | 3.915  | 5,79 | 5.015 | 5.179 |
| <b>23</b> | 313,15 | 1,652 | 0,0151 | 4      | 0.07  | 4 | 3.9142 | 7,97 | 5.031 | 5.173 |
| <b>24</b> | 313,15 | 1,652 | 0,0151 | 5      | 0.07  | 4 | 3.8591 | 9,5  | 8.549 | 8.557 |
| <b>25</b> | 313,15 | 1,652 | 0,021  | 1,4287 | 0.052 | 3 | 2.9749 | 3,25 | 2.962 | 2.987 |
| <b>26</b> | 313,15 | 1,652 | 0,021  | 2,7273 | 0.052 | 3 | 2.9552 | 5,79 | 5.347 | 5.358 |
| <b>27</b> | 313,15 | 1,652 | 0,021  | 4      | 0.052 | 3 | 2.9383 | 7,97 | 7.401 | 7.416 |
| <b>28</b> | 313,15 | 1,652 | 0,021  | 5      | 0.052 | 3 | 2.9263 | 9,5  | 8.862 | 8.874 |
| <b>29</b> | 313,15 | 1,652 | 0,021  | 1,4287 | 0.07  | 4 | 3.9621 | 3,25 | 2.818 | 2.837 |
| <b>30</b> | 313,15 | 1,652 | 0,021  | 2,7273 | 0.07  | 4 | 3.9322 | 5,79 | 4.989 | 5.106 |
| <b>31</b> | 313,15 | 1,652 | 0,021  | 4      | 0.07  | 4 | 3.9064 | 7,97 | 6.962 | 7.09  |
| <b>32</b> | 313,15 | 1,652 | 0,021  | 5      | 0.07  | 4 | 3.8882 | 9,5  | 8.445 | 8.501 |

**Tableau III.5. Résultats de simulation d'absorption de CO<sub>2</sub> par BDA**

III.6. Résultats et interprétations :

Système DEEA-CO<sub>2</sub> :

**Tableau III. 6 : Différence de concentration système DEEA-CO<sub>2</sub>**

| Température (K) | C <sub>DEEA</sub> 10 <sup>-3</sup> (mol/l) | C <sub>CO<sub>2e</sub></sub> 10 <sup>-3</sup> (mol/l) | C <sub>CO<sub>2s</sub></sub> 10 <sup>-3</sup> (mol/l) | ΔC <sub>CO<sub>2</sub></sub> 10 <sup>-3</sup> (mol/l) |
|-----------------|--|---|---|---|
| <b>303,15</b>   | 2  | 3,25  | <b>3,249</b>  | <b>0,001</b>  |
| <b>303,15</b>   | 2  | 5,79  | <b>5,789</b>  | <b>0,001</b>  |
| <b>303,15</b>   | 2  | 7,97  | <b>7,969</b>  | <b>0,001</b>  |
| <b>303,15</b>   | 2  | 9,5   | <b>9,459</b>  | <b>0,001</b>  |
| <b>313,15</b>   | 4  | 3,25  | <b>3,249</b>  | <b>0,001</b>  |
| <b>313,15</b>   | 4  | 5,79  | <b>5,789</b>  | <b>0,001</b>  |
| <b>313,15</b>   | 4  | 7,97  | <b>7,969</b>  | <b>0,001</b>  |
| <b>313,15</b>   | 4  | 9,5   | <b>9,499</b>  | <b>0,001</b>  |

Système BDA-CO<sub>2</sub> :

**Tableau III. 7 : Différence de concentration système BDA-CO<sub>2</sub>**

| Température (K) | C <sub>BDA</sub> 10 <sup>-3</sup> (mol/l) | C <sub>CO<sub>2e</sub></sub> 10 <sup>-3</sup> (mol/l) | C <sub>CO<sub>2s</sub></sub> 10 <sup>-3</sup> (mol/l) | ΔC <sub>CO<sub>2</sub></sub> 10 <sup>-3</sup> (mol/l) |
|-----------------|---|---|---|---|
| <b>303,15</b>   | 2   | 3,25  | 3,1   | <b>0,15</b>   |
| <b>303,15</b>   | 2   | 5,79  | 5,6   | <b>0,19</b>   |
| <b>303,15</b>   | 2   | 7,97  | 7,7   | <b>0,27</b>   |
| <b>303,15</b>   | 2   | 9,5   | 9,2   | <b>0,3</b>  |
| <b>313,15</b>   | 4   | 3,25  | 2,8   | <b>0,45</b>   |
| <b>313,15</b>   | 4   | 5,79  | 5,1   | <b>0,69</b>   |
| <b>313,15</b>   | 4   | 7,97  | 7,1   | <b>0,87</b>   |
| <b>313,15</b>   | 4   | 9,5   | 8,5   | <b>1,00</b>   |

En augmentant les concentrations de l'amine et de  $\text{CO}_2$  à l'entrée de la colonne à garnissage mais aussi la température, les tableaux III.6 et III.7 montrent que l'amine BDA absorbe une quantité entre 4% jusqu'à 10% par rapport à celle d'entrée alors que la DEEA absorbe beaucoup moins (environ 1%). cela revient à la nature des amines tertiaires qui sont moins réactives par rapport aux amines primaires.

La BDA est un absorbant prometteur pour le  $\text{CO}_2$  vu sa structure moléculaire qui possède deux groupements amine qui fournissent l'alcalinité nécessaire en solution aqueuse pour assurer l'absorption de  $\text{CO}_2$ .

## **Conclusion**

## Conclusion

- ✓ *Le modèle mathématique de simulation d'absorption de CO<sub>2</sub> par une amine nous a permis de voir le lien direct entre les taux d'absorption et la nature de l'amine primaire ou tertiaire.*
- ✓ *La capacité d'absorption de CO<sub>2</sub> dépend fortement de la concentration de l'amine et de CO<sub>2</sub> à l'entrée de la colonne à garnissage ainsi que la température à laquelle on opère.*
- ✓ *Notre modèle mathématique est basé sur de nombreuses corrélations dont Onda et Wilke-Chang et autres pour estimer les concentrations de CO<sub>2</sub> et de l'amine en sortie de la colonne.*
- ✓ *On a bien amélioré dans le squelette de modèle mathématique d'AMRANI :*
  - ✚ AMRANI a fixé l'erreur à 6% au lieu de 1% car il a eu un problème de convergence par contre on est arrivé à régler ce problème et même on a fixé une erreur jusqu'à 0.1%, de ce fait les concentrations de CO<sub>2</sub> à la sortie de la colonne calculées par notre programme sont plus proches que les concentrations de CO<sub>2</sub> expérimentales de MR AMRANI et cela par apport aux valeurs estimées à la sortie par le calcul d'intégral.
  - ✚ le pas utilisé dans le calcul de flux dans la colonne est dix fois plus petit que celui utilisé par AMRANI, ce qui donne une bonne simulation de ce qui se passe à l'intérieur de la colonne.
  - ✚ AMRANI a calculé les propriétés physico-chimiques pour deux températures mais notre modèle mathématique permet de calculer ses propriétés automatiquement pour des températures comprises entre 298K et 313K
  - ✚ En fin, notre programme n'a pas besoin d'une valeur proche de celle de la sortie (concentration de gaz à la sortie) pour tourner (histoire de minimiser les itérations et le temps de calcul). mais plus encore, il oriente l'utilisateur concernant la concentration de gaz à la sortie en affichant des commentaires pour ne pas introduire des concentrations à l'entrée qui donnent des concentrations négatives à la sortie.

## Références

### Références

- [1] S. AMRANI, Détermination de l'aire interfaciale d'une colonne d'absorption du CO<sub>2</sub> par une solution de monoéthanolamine (MEA), Thèse Magister, Génie Chimique, Ecole Nationale Polytechnique, 2009.
- [2] C. DESCHAMPS, Etude de la capture de CO<sub>2</sub> par absorption physique dans les systèmes de production d'électricité basés sur la gazéification du carbon intégrée à un cycle combiné, Thèse de Doctorat, Ecole des mines de Paris, 2004.
- [3] L. D. R, CRC Handbook of Chemistry and Physics, Boca Raton, Florida: CRC press, 2005.
- [4] J.-M. AMANN, Etude de procédés de captage du CO<sub>2</sub> dans les centrales thermiques, Thèse de Doctorat, Ecole des mines de Paris, 2007.
- [5] A. BENREDOUANE, «Master: Solubilité d'un mélange Alkanolamine,» 2015.
- [6] A. M. D. ZAWISZA, *Journal of Chemical Engineering Data*, vol. 26, pp. 388-391, 1981.
- [7] K.-P. L. M.-H. SHEN, *Journal of Chemical Engineering Data*, vol. 37, pp. 96-100, 1992.
- [8] Y. A. K. G. L. S. N. A. ANUFRIKOV, «Solubility of CO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>S in alkanolamine-containing aqueous solutions,» *Russian Journal of Applied Chemistry*, vol. 80, pp. 515-527, 2007.
- [9] A. N. R. KOHL, Gas Purification, 5th édition, Gulf Publishing Company: Houston, TX, USA, 1997.
- [10] B. GOAR, *Oil Gas Journal*, vol. 78, pp. 239-242, 1980.
- [11] W. ., A. C. YU, *Chemical Engineering Science*, vol. 42, pp. 419-424, 1987.
- [12] V. A. R. SRINIVASAN, *Fuel Process. Tech- nol.*, vol. 19, pp. 141-152, 1988.
- [13] M. B. S. KUNDU, *Journal of Chemical Engineering Data*, vol. 51, pp. 398-405, 2006.
- [14] K. A. BENREDOUNE, «Absorption du CO<sub>2</sub> par un mélange d'amines,» Ecole nationale polytechnique d'Alger , 2015.
- [15] S. SEDDARI, *Simulation d'une colonne à garnissage d'absorption du CO<sub>2</sub> par une solution aqueuse de MEA à 25°C et à 40°C*, Thèse de Magister, Génie Chimique, Ecole Nationale Polytechnique, 2004, p. 8.
- [16] P. DANCKWERTS, Gas-Liquid Reaction, McGraw-Hill, New York, 1970.
- [17] G. W. S. P.M.M. BLAUWHOFF, « A study on the reaction between CO<sub>2</sub> and alkanolamines in aqueous solutions,» *Chem. Engng. Sci*, vol. 38 , p. 1411 – 1429, 1983.
- [18] Y. Wang, C. Zhang et S. Qin, Kinetics study on absorption of carbon dioxide in aqueous MDEA, *J. Chem. Ind. Eng. (China)*, 1991.

## Références

- [19] X. Zhicheng, W. Shujuan et C. Changhe, «Solubility of N<sub>2</sub>O in and Density and Viscosity of Aqueous Solutions,» *Chemical Engineering Data*, vol. 58, p. 1633–1640, 2013.
- [20] N. B. VARGAFTIK, B. N. VOLKOV et L. D. VOLJAK, «International Tables of the Surface Tension of Water,» *Physical Chemical Reference Data*, vol. 12, n° 13, 1983.
- [21] X. Zhicheng , W. Shujuan et C. Changhe, «Kinetics Study on CO<sub>2</sub> Absorption with Aqueous Solutions of 1,4-Butanediamine, 2-(Diethylamino)-ethanol, and Their Mixtures,» *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 52, p. 9790–9802, 2013.
- [22] P. TRAMBOUZE, H. V. LANDEGHEM et J. P. WAUQUIER, *Les réacteurs chimiques, conception/calcul/mise en oeuvre*“, Ed, Technip, 1984.