

Dimensionnement d'une colonne d'absorption de CO₂ par une solution aqueuse d'amine.

Introduction.

Dans ce problème, on s'intéresse à un procédé de capture du dioxyde de carbone (CO₂) contenu dans un effluent gazeux provenant d'une centrale électrique thermique. Un procédé de capture de CO₂ vise à séparer le CO₂ des autres constituants de l'effluent (qui peut alors être envoyé à l'atmosphère) et à produire un flux concentré de CO₂ afin qu'il puisse être compressé. Ce CO₂ presque pur peut alors être séquestré de façon rentable ou valorisé dans un procédé de récupération assistée du pétrole (technique consistant à injecter le CO₂ dans des puits de pétrole afin d'en augmenter la pression).

Parmi les différentes technologies disponibles à l'heure actuelle, le procédé de capture de CO₂ par une solution aqueuse d'amine dans une colonne à garnissage est celui le plus souvent utilisé et le mieux maîtrisé. En effet, il permet une grande flexibilité opératoire et est particulièrement adapté pour les concentrations en CO₂ typiques des fumées des centrales thermiques.

Un schéma de principe de ce procédé de capture est présenté à la Figure 1. L'effluent gazeux contenant le CO₂ est injecté à la base d'une colonne à garnissage (à gauche de la Figure 1), tandis qu'une solution aqueuse riche en amine est introduite par le haut et s'écoule donc dans la colonne à contre-courant du gaz.

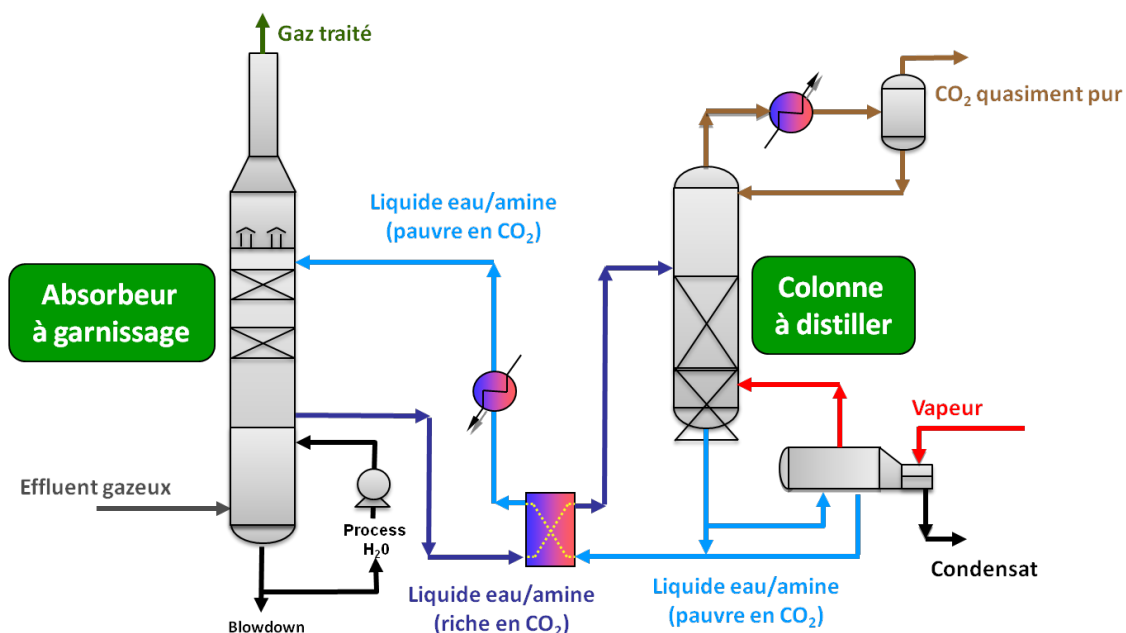


Figure 1: Schéma de principe d'un procédé de capture du CO₂.

Le CO₂ est un gaz relativement bien soluble dans l'eau (par rapport au dioxygène par exemple). Par conséquent, lorsque la phase gazeuse entre en contact avec la phase liquide dans la colonne à garnissage, le CO₂ en phase gazeuse est transféré dans la phase liquide, au sein de laquelle il réagit très rapidement avec l'amine présente en solution pour former une espèce appelée carbamate. La consommation du CO₂ par cette réaction permet évidemment

d'augmenter considérablement la capacité d'absorption de la phase liquide et donc la vitesse du transfert gaz-liquide du CO_2 (voir cours de génie des réacteurs).

Les autres composants du gaz sont le diazote (N_2), la vapeur d'eau (H_2O) et l'argon (Ar). Étant donné que l'effluent gazeux provient d'un processus de combustion d'un hydrocarbure, le gaz est saturé en vapeur d'eau. On admet donc qu'il n'y a pas de transfert d' H_2O entre les phases liquide et gazeuse dans la colonne. N_2 et Ar sont, quant à eux, quasiment insolubles dans l'eau. On fait donc ici l'hypothèse que seul le CO_2 est échangé entre le gaz et le liquide dans la colonne à garnissage. C'est pourquoi tout ce qui n'est pas du CO_2 dans la phase gazeuse est appelé le gaz « inerte ».

Grâce à l'absorption du CO_2 par la solution aqueuse d'amine, la phase gazeuse sortant par le haut de la colonne à garnissage ne contient pratiquement plus de CO_2 (si la colonne est bien dimensionnée). Le gaz ainsi traité peut alors être envoyé à l'atmosphère.

Le liquide récupéré à la base de la colonne à garnissage est appelé le liquide riche, car il est riche en carbone. Ce liquide riche est ensuite envoyé dans une colonne à distiller (à droite de la Figure 1), dans laquelle il est chauffé jusqu'à environ 110°C afin d'inverser la réaction entre le CO_2 et l'amine (i.e. reformer du CO_2 et de l'amine à partir du carbamate). Le CO_2 se désorbe alors de la solution et forme, avec de l'eau, la phase gazeuse au sein de la colonne à distiller.

Le liquide récupéré à la base de la colonne à distiller est appelé le liquide pauvre. En effet, il contient quand même encore un peu de carbone, la réaction de reformation de l'amine et du CO_2 à partir du carbamate n'étant généralement pas complète dans la colonne à distiller, pour des raisons économiques. Ce liquide est réinjecté dans la colonne à garnissage (voir Figure 1).

La phase gazeuse récupérée au sommet de la colonne à distiller est un mélange de CO_2 et d'eau. Ce gaz est ensuite condensé pour séparer la vapeur d'eau du CO_2 . On récupère ainsi une phase gazeuse de CO_2 pratiquement pur.

Dimensionnement de la colonne d'absorption¹

On souhaite réaliser le dimensionnement d'une colonne à garnissage d'un procédé de capture de CO_2 par absorption dans une solution aqueuse d'amine. Le dimensionnement consiste à déterminer les caractéristiques géométriques de la colonne compte tenu, entre autres, des objectifs à atteindre et des caractéristiques du gaz à traiter, ainsi que du liquide et du garnissage employés. Ces colonnes sont quasi exclusivement de forme cylindrique. Leur dimensionnement consiste donc essentiellement à déterminer leur diamètre et leur hauteur.

Considérons un cas de figure où il faut traiter $50000 \text{ Nm}^3/\text{h}$ d'un effluent gazeux². Étant donné que les gaz sont compressibles, il est en effet d'usage dans la pratique industrielle d'exprimer les quantités de gaz en Nm^3 . Le gaz entrant dans la colonne est à 3 bars et à 40°C (et il peut être considéré comme parfait).

¹ Note : dans le reste de ce document, si le terme "colonne" est écrit seul, il réfère à la colonne à garnissage (i.e. à la colonne d'absorption gaz-liquide).

² Pour la définition du normo mètre cube : https://fr.wikipedia.org/wiki/Normo_mètre_cube

La composition du gaz injecté à la base de la colonne est connue. Les informations relatives à cette composition sont données en annexe (Tableau 1).

Afin de bénéficier des meilleures exonérations fiscales sur l'émission de gaz à effet de serre, une réglementation impose que la fraction molaire en CO₂ dans le gaz relâché à l'atmosphère soit inférieure à 5 10⁻⁵.

L'amine utilisée est de la monoéthanolamine (MEA), dont la formule semi-développée est HO-CH₂-CH₂-NH₂. Etant donné que c'est la fonction amine qui réagit avec le CO₂, il est d'usage d'utiliser la notation RNH₂ pour la MEA, où R- représente le radical éthanol OH-CH₂-CH₂-. La MEA réagit avec le CO₂ selon la réaction globale suivante :



où RNHCOO⁻ est le carbamate et RNH₃⁺ est appelée la forme protonée de l'amine. On considère que cette réaction est complète dans le cœur de la phase liquide (i.e. au delà du film liquide présent au contact de l'interface gaz-liquide, voir cours de génie des réacteurs). Il n'y a donc pas de CO₂ dans le cœur de la phase liquide, tout le carbone transféré du gaz vers le liquide y est présent dans des molécules de carbamate.

La solution aqueuse d'amine utilisée est une préparation à usage industriel qui est vendue prête à l'emploi et qui contient (tant qu'elle n'a pas absorbé de CO₂) 30% en masse de RNH₂ (le reste étant donc de l'eau tant que la solution n'a pas absorbé de CO₂).

A une hauteur donnée dans la colonne, on exprime généralement la quantité de CO₂ absorbée par le liquide en terme de taux de charge, noté θ . Ce taux de charge est défini comme le nombre de moles de CO₂ qu'un m³ de liquide a absorbé, divisé par le nombre total de moles du radical R- (qu'il soit dans l'amine, l'amine protonée ou le carbamate), par m³ du liquide. Ce taux de charge peut donc être calculé de la manière suivante :

$$\theta = \frac{[\text{CO}_2]_{\text{abs}}}{[\text{MEA}]_0} = \frac{[\text{RNHCOO}^-]}{[\text{RNH}_2] + [\text{RNH}_3^+] + [\text{RNHCOO}^-]}$$

où [CO₂]_{abs} est le nombre de moles de CO₂ qu'un m³ du liquide a absorbé (égal donc à la concentration en carbamate dans le liquide, [RNHCOO⁻], en mol/m³), [MEA]₀ est la concentration en MEA dans une solution aqueuse d'amine qui n'aurait pas encore absorbé de CO₂ (mol/m³), et [RNH₂] et [RNH₃⁺] sont respectivement les concentrations en amine et amine protonée dans le liquide (mol/m³). Compte tenu de la stœchiométrie de la réaction, le taux de charge θ est donc compris entre 0 (liquide sans carbone absorbé) et 0,5 (toute la MEA a réagi).

Afin de ne pas consommer trop d'énergie dans le processus de régénération du liquide (dans la colonne à distiller), le producteur recommande que le taux de charge du liquide pauvre (sortant de la colonne à distiller et entrant dans la colonne à garnissage) soit de 0,1. De même, afin de garantir une absorption efficace partout dans la colonne à garnissage, il est recommandé que le taux de charge du liquide à sa sortie de la colonne ne dépasse pas 0,3 (i.e. on souhaite que le liquide quittant la colonne ait toujours un pouvoir absorbant pour le CO₂, ce qui garantit que le transfert gaz-liquide se déroule toujours à une vitesse raisonnable ; s'il n'y a plus de MEA il y a certes toujours un transfert, mais très lent par rapport au transfert en présence de MEA, étant donné que la réaction entre le CO₂ et la MEA accélère fortement le transfert).

Le garnissage utilisé est le Ceramic Intalox Saddle, qui est un garnissage très courant pour ce type d'applications. Une image d'un élément de ce garnissage est présentée à la Figure 2 et les caractéristiques de ce garnissage sont présentées au Tableau 2 (en annexe).



Figure 2: Image d'un élément de garnissage Ceramic Intalox Saddle.

La colonne d'absorption opère à une température de 40°C et nous considérons que cette température est homogène au sein de la colonne.

Lorsqu'on modélise une colonne à garnissage, les phases gazeuse et liquide sont généralement chacune modélisées par un réacteur piston (PFTR, voir Figure 3), avec des sens de l'écoulement opposés (« contre-courant » : le gaz monte et le liquide descend). Ces deux réacteurs sont séparés par une interface, au travers de laquelle les deux phases échangent du CO₂.

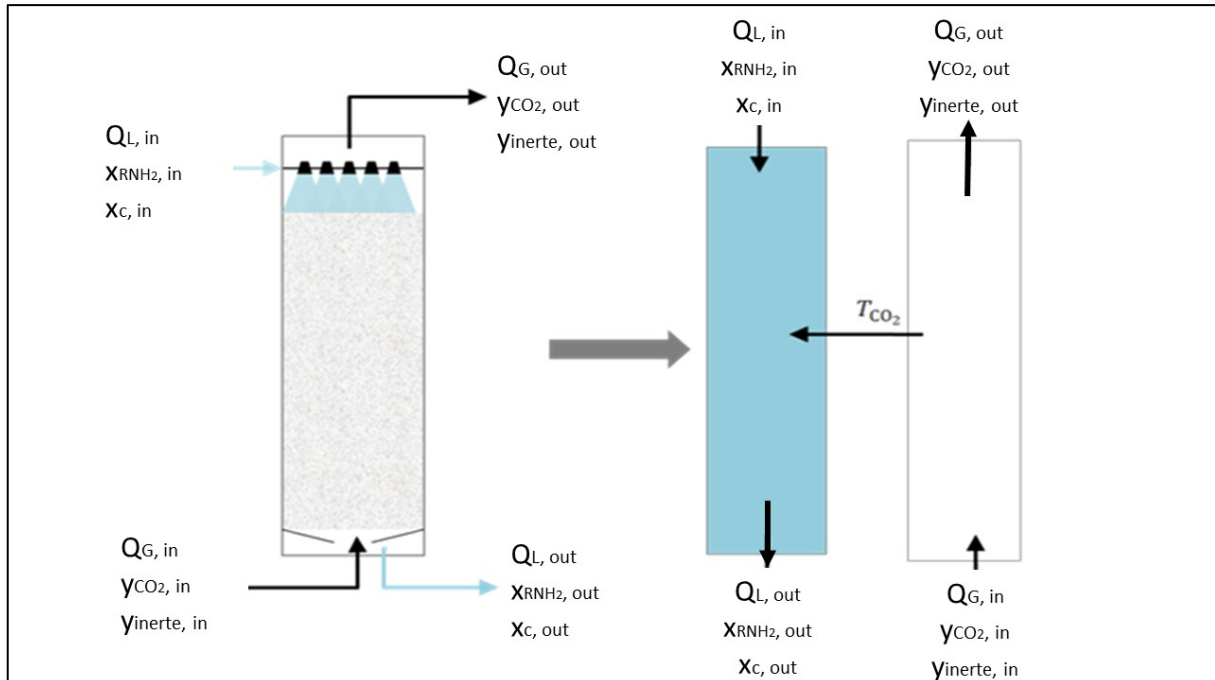


Figure 3: Schéma de principe de la modélisation d'une colonne à garnissage.

On note $Q_{G,in}$ et $Q_{G,out}$ les débits (en mol/s) de la phase gazeuse à l'entrée (en bas) et à la sortie (en haut) de la colonne, tandis que $y_{CO_2,in}$ et $y_{CO_2,out}$ sont les

fractions molaires (en mol/mol_{gaz}) de CO₂ dans la phase gazeuse à l'entrée et à la sortie de la colonne.

Pour la phase liquide, nous notons $Q_{L, \text{in}}$ et $Q_{L, \text{out}}$ les débits (en mol/s) de liquide à l'entrée (en haut) et à la sortie (en bas) de la colonne. Nous notons $x_{\text{RNH}_2, \text{in}}$ et $x_{\text{RNH}_2, \text{out}}$ les fractions molaires (en mol/mol_{solution}) de RNH₂ dans la phase liquide à l'entrée et à la sortie de la colonne. Nous notons encore $x_{c, \text{in}}$ et $x_{c, \text{out}}$ les fractions molaires en carbamate dans la phase liquide à l'entrée et à la sortie de la colonne. Enfin, le taux global de CO₂ transféré de la phase gazeuse dans la phase liquide (en mol/s, pour l'ensemble de la colonne) se note T_{CO_2} .

Question 1

Compte tenu du débit et des caractéristiques du gaz à traiter, et si on fixe les taux de charge du liquide à l'entrée et à la sortie de la colonne à leurs valeurs recommandées par le fabricant (respectivement 0,1 et 0,3), on vous demande de déterminer la valeur minimum du débit molaire de liquide à utiliser, $Q_{L,in}$, afin de satisfaire la réglementation en vigueur sur la composition du gaz relâché à l'atmosphère. Exprimez aussi ce débit en m^3/h (la masse volumique du liquide, considérée indépendante de sa composition, est donnée au Tableau 4 en annexe).

Ce calcul peut être réalisé à l'aide de plusieurs bilans globaux (c'est-à-dire entre l'entrée et la sortie de la colonne), portant sur le liquide et le gaz (dans leur entièreté ou pour le carbone présent dans chacune de ces phases).

Question 2

Dans la pratique industrielle, le diamètre d'une colonne à garnissage est généralement déterminé sur base de la vitesse superficielle du gaz à l'engorgement, notée $V_{s,g,e}$. La vitesse superficielle du gaz est définie comme le rapport du débit de gaz à l'entrée de la colonne (en m^3/s) et de l'aire de la base de la colonne, Ω (en m^2). A débit de gaz fixé, on voit donc que la vitesse superficielle du gaz diminue si le diamètre de la colonne augmente. La vitesse superficielle du gaz à l'engorgement est la vitesse superficielle du gaz au dessus de laquelle le liquide est refoulé vers le haut de la colonne (i.e. si la vitesse superficielle du gaz est supérieure à $V_{s,g,e}$, alors le liquide ne peut plus descendre dans la colonne).

Des corrélations de la littérature (voir Tableau 3 en annexe) sont couramment utilisées pour calculer $V_{s,g,e}$ en fonction du type de garnissage et des caractéristiques des fluides employés (voir Tableau 4 en annexe).

Une bonne pratique pour les colonnes à garnissage est de choisir le diamètre de la colonne de sorte que la vitesse superficielle du gaz soit approximativement égale à 60% de $V_{s,g,e}$. Toutefois, lorsqu'on utilise une solution d'amine, la pratique a montré qu'une autre condition doit être satisfaite : la perte de charge linéique $\frac{\partial p}{\partial z}$ en phase gazeuse (i.e. la diminution de pression du gaz lorsqu'on monte d'un mètre dans la colonne ; on donne une corrélation au Tableau 3 en annexe pour la calculer) ne doit pas dépasser une certaine limite. Au-delà de cette limite, ces solutions ont tendance à mousser, ce qui est défavorable pour le transfert gaz-liquide. La perte de charge linéique maximum recommandée est $\left(\frac{\partial p}{\partial z}\right)_{\max} = 205 \frac{\text{Pa}}{\text{m}}$.

Sur base de ces informations et des corrélations fournies en annexe, on vous demande de déterminer le diamètre de la colonne (i.e. soit le diamètre tel que la vitesse superficielle du gaz soit égale à $0.6 V_{s,g,e}$ ou, si ce diamètre amène à un $\frac{\partial p}{\partial z} > 205 \frac{\text{Pa}}{\text{m}}$, le diamètre conduisant à $\frac{\partial p}{\partial z} = 205 \frac{\text{Pa}}{\text{m}}$).

Question 3³

Soit z une coordonnée verticale, avec $z = 0$ à la base de la colonne.

En considérant un élément de la colonne, compris entre les hauteurs z et $z+\Delta z$, on vous demande d'établir, par la réalisation de quatre bilans de matière (voir Figure 4), les équations différentielles décrivant l'évolution, le long de la colonne, des débits molaires de liquide et de gaz et des fractions molaires en RNH_2 dans la phase liquide et en CO_2 dans la phase gazeuse. A la Figure 4, $Q_L(z)$ est le débit molaire de liquide à la position z dans la colonne, $Q_G(z)$ est le débit molaire de gaz à la position z dans la colonne (mol/s), $x_{\text{RNH}_2}(z)$ est la fraction molaire en RNH_2 dans le liquide à la position z , $y_{\text{CO}_2}(z)$ est la fraction molaire en CO_2 dans le gaz à la position z et $p(z)$ est la pression du gaz à la position z .

Rappelons que la phase gazeuse est compressible. La pression totale dans le gaz diminue avec la hauteur. Cette évolution est reliée à la densité de perte de charge linéique mentionnée plus haut (i.e. la pression du gaz diminue de $\frac{\partial p}{\partial z}$ Pascals lorsqu'on monte d'un mètre dans la colonne). La phase liquide, quant à elle, est supposée incompressible et, donc, comme déjà mentionné, on considère sa masse volumique est constante (même si sa composition varie).

A la Figure 4, $t_{\text{CO}_2}(z)$ est le taux de transfert gaz-liquide de CO_2 à la hauteur z , exprimé en nombre de moles de CO_2 transférées par unité de temps et par unité de hauteur de la colonne ($\Omega^{-1}t_{\text{CO}_2}(z)$ est donc le nombre de moles de CO_2 transférées du gaz vers le liquide par unité de temps et par unité de volume de la colonne). Afin de pouvoir « fermer » les bilans de matière, il faut pouvoir exprimer ce taux de transfert en fonction de $x_{\text{RNH}_2}(z)$, $y_{\text{CO}_2}(z)$ et $p(z)$.

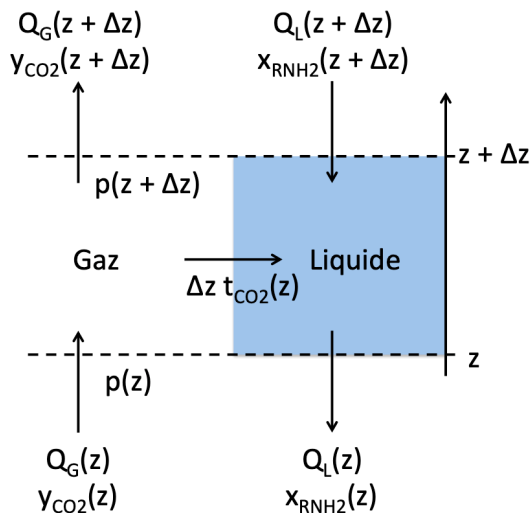


Figure 4: Termes impliqués pour l'expression des bilans de matière sur une tranche $[z, z+\Delta z]$ de la colonne.

³ Note : dans cette section, les développements diffèrent légèrement de ceux du cours de génie des réacteurs de Frédéric Debaste, à deux niveaux : (1) nous n'utilisons pas exactement la même définition de la « constante de solubilité » (noté h ici) et (2) j'incorpore le facteur d'accélération E dans l'expression du « coefficient de transfert global » K_{GL} , alors que Frédéric Debaste ne le fait pas. Nos deux approches sont évidemment strictement identiques, c'est juste une question de formalisme mathématique.

Il est communément admis que la vitesse d'absorption dépend essentiellement des phénomènes prenant place aux interfaces gaz-liquide. Il existe plusieurs théories permettant de relier la vitesse globale de transfert avec les propriétés physico-chimiques des fluides en contact et les conditions hydrodynamiques gouvernant leur écoulement.

La théorie la plus couramment utilisée est la théorie des deux films. Dans cette théorie, on considère que la vitesse de transfert dépend de la vitesse à laquelle l'espèce considérée (ici le CO_2) peut diffuser au travers de deux films, un dans chaque phase, situés de part et d'autre de l'interface et en contact avec cette dernière, comme représenté schématiquement à la Figure 5.

La vitesse de transfert d'une espèce X au travers de ces films dépend de leur coefficient de transfert. Si k_G et k_L sont respectivement les coefficients de transfert de la phase gazeuse et de la phase liquide (exprimés en m/s), la densité de flux de transfert f (donnant le nombre de moles de X transférées par unité de temps et par unité d'aire de la surface de contact gaz-liquide) s'exprime comme :

$$f = k_G(c_{X,g} - c_{X,g}^{\text{int}}) = k_L(c_{X,l}^{\text{int}} - c_{X,l})$$

où $c_{X,g}$ et $c_{X,l}$ sont les concentrations (mol/m^3) de l'espèce X dans le gaz et dans le liquide loin de l'interface (i.e. dans le cœur des phases), tandis que $c_{X,g}^{\text{int}}$ et $c_{X,l}^{\text{int}}$ sont les concentrations de l'espèce X dans le gaz et dans le liquide à l'interface (en mol/m^3). Il est généralement admis que les concentrations à l'interface sont à l'équilibre. Dès lors, $c_{X,g}^{\text{int}}$ et $c_{X,l}^{\text{int}}$ sont reliés par $c_{X,l}^{\text{int}} = h c_{X,g}^{\text{int}}$ où h est la constante de solubilité de l'espèce considérée.

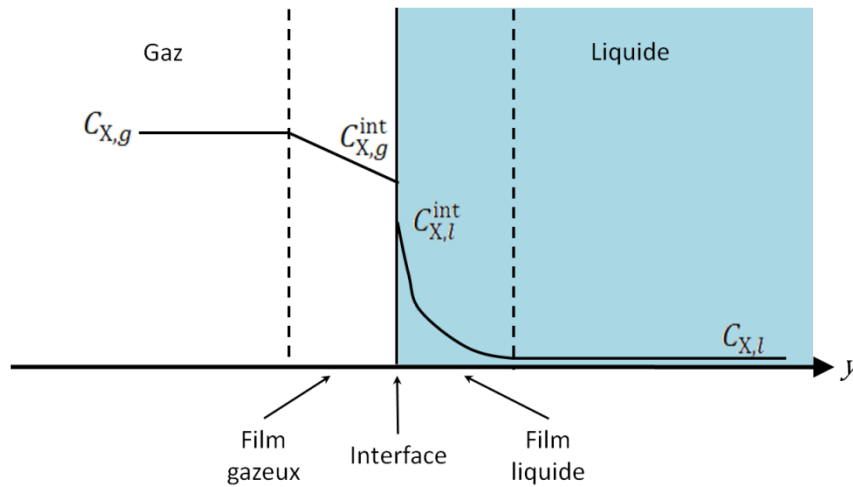


Figure 5: Représentation schématique du modèle des deux films.

Dans le cas de l'absorption du CO_2 par une solution aqueuse d'amine, l'existence de la réaction en phase liquide avec l'amine amplifie le coefficient de transfert en phase liquide k_L . On appelle facteur d'accélération, noté E , le coefficient par lequel il faut multiplier le k_L (voir cours de génie des réacteurs) pour tenir compte de cette réaction. En outre, comme déjà mentionné, on peut considérer comme nulle la concentration en CO_2 dans le liquide loin de l'interface ($c_{\text{CO}_2,l} = 0$). Dès lors, la densité de flux de transfert de CO_2 se calcule comme :

$$f_{\text{CO}_2} = k_G(c_{\text{CO}_2,g} - c_{\text{CO}_2,g}^{\text{int}}) = E k_L c_{\text{CO}_2,g}^{\text{int}}$$

avec $c_{\text{CO}_2,l}^{\text{int}} = h_{\text{CO}_2} c_{\text{CO}_2,g}^{\text{int}}$, où h_{CO_2} est la constante de solubilité du CO_2 .

La loi des gaz parfaits nous indique que $c_{\text{CO}_2,g}$ à la hauteur z dépend de la pression du gaz p et de la fraction molaire en CO_2 du gaz, y_{CO_2} , à cette hauteur :

$$c_{\text{CO}_2,g}(z) = \frac{p(z)}{R T} y_{\text{CO}_2}(z)$$

où R est la constante des gaz parfait et T la température absolue.

Il est d'usage d'exprimer la densité de flux de transfert sous une forme globale

$$f_{\text{CO}_2}(z) = K_{GL}(z) c_{\text{CO}_2,g}(z)$$

où K_{GL} est un coefficient de transfert global. Vous devez donc exprimer le coefficient de transfert global K_{GL} en fonction de k_G , k_L , E et h_{CO_2} .

Le taux de transfert à la hauteur z , $t_{\text{CO}_2}(z)$, se relie à la densité de flux de transfert $f_{\text{CO}_2}(z)$ par :

$$\Omega^{-1} t_{\text{CO}_2}(z) = \mathcal{A} f_{\text{CO}_2}(z)$$

où Ω est l'aire de la base de la colonne (en m^2) et \mathcal{A} la densité d'aire interfaciale (m^2 d'aire de la surface de contact gaz-liquide par m^3 de colonne).

Des corrélations de la littérature sont disponibles en annexe pour pouvoir calculer les coefficients de transfert (voir Tableau 3), le facteur d'accélération dans le cas où la réaction est extrêmement rapide (voir Tableau 5) et les paramètres physico-chimiques (voir Tableau 6) du système.

Question 4

On vous demande finalement de déterminer la hauteur minimale de la colonne permettant d'atteindre la condition souhaitée sur la concentration en CO_2 dans le gaz quittant la colonne. Réalisez ceci en résolvant numériquement les équations différentielles obtenues à la question 3 en fonction de z , et en utilisant les conditions déjà déterminées en bas de la colonne comme conditions aux limites en $z = 0$ de ces équations.

Annexes

Tableau 1: Composition du gaz injecté.

| Composant | Pourcentage molaire | Masse molaire [g/mol] |
|------------------|---------------------|-----------------------|
| N ₂ | 71.67 % | 28 |
| CO ₂ | 19.30 % | 44 |
| H ₂ O | 8.11 % | 18 |
| Ar | 0.92 % | 40 |

Tableau 2: Caractéristiques du garnissage Ceramic Intalox Saddle.

| Grandeur | Notation | Valeur | Unité |
|---|---------------|--------|------------------|
| Diamètre nominal d'un élément | d_p | 25 | mm |
| Porosité du garnissage. $(1 - \varepsilon)$ est donc le volume d'éléments par unité de volume de la colonne. | ε | 0.74 | - |
| Nombre d'éléments par unité de volume de la colonne | N | 85 | dm ⁻³ |
| Facteur d'empilement | F_p | 320 | m ⁻¹ |
| Aire de la surface d'un élément par unité de volume d'appareil Surface spécifique d'un élément exposée au liquide par unité de volume (si un élément est entièrement recouvert par le liquide) | A_p | 250 | m ⁻¹ |
| Tension de surface critique | σ_c | 61 | mN/m |

Tableau 3: Corrélations pour les colonnes à garnissage.

| | |
|----------------------|---|
| Hydrodynamique | $\pi_1 = \frac{F_p}{g} \frac{\rho_g}{\rho_l} \frac{\rho_w}{\rho_l} \left(\frac{\mu_l}{\mu_w} \right)^{0.2} V_{s,g}^2$ $\pi_2 = \frac{V_{s,l}}{V_{s,g}} \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}} = \frac{Q_{L,in}}{Q_{G,in}} \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}}$ |
| Engorgement | $\ln \pi_{1,e} = 0.1117 - 4.012 \pi_2^{0.25}$ $\left(\frac{V_{s,g}}{V_{s,g,e}} \right)^2 = \frac{\pi_1}{\pi_{1,e}}$ |
| Perte de charge | $\frac{\partial p}{\partial z} = 98 \frac{\pi_1}{\pi_{1,e}} \left(A_1 + A_2 \frac{\pi_1}{\pi_{1,e}} \right)$ $A_1 = 21.79 - 36.19 \pi_2^{0.25} + 16.60 \pi_2^{0.5}$ $A_2 = 7.06 + 10.30 \pi_2^{0.25} - 10.36 \pi_2^{0.5}$ |
| Transfert de matière | $\frac{k_G}{A_p D_{X,g}} = 5.23 (A_p d_p)^{-2} \left(\frac{V_{s,g} \rho_g}{\mu_g A_p} \right)^{0.7} \left(\frac{\mu_g}{\rho_g D_{X,g}} \right)^{0.5}$ $\frac{k_L}{A_p D_{X,l}} = 0.0051 (A_p d_p)^{0.4} \left(\frac{V_{s,l} \rho_l}{\mu_l A_p} \right)^{1.33} \left(\frac{\mu_l}{\rho_l D_{X,l}} \right)^{0.5} \left(\frac{V_{s,l}^2 A_p}{g} \right)^{-0.33}$ $\mathcal{A} = A_p \left(1 - \text{Exp} \left(-1.45 \left(\frac{\sigma_c}{\sigma} \right)^{0.75} \left(\frac{V_{s,l} \rho_l}{\mu_l A_p} \right)^{0.1} \left(\frac{V_{s,l}^2 \rho_l}{\sigma A_p} \right)^{0.2} \left(\frac{V_{s,l}^2 A_p}{g} \right)^{-0.05} \right) \right)$ |

avec

$V_{s,l}$ et $V_{s,g}$: vitesses superficielles du liquide et du gaz à leur entrée dans la colonne (en m/s)

$Q_{L,in}$ et $Q_{G,in}$: débits du liquide et du gaz à leur entrée dans la colonne (!! en m³/s ici !!)

ρ_l et ρ_g : masses volumiques du liquide et du gaz (en kg/m³). Pour le gaz, il s'agit de la valeur de sa masse volumique à l'entrée de la colonne.

μ_l et μ_g : viscosités dynamiques du liquide et du gaz à leur entrée dans la colonne (en Pa.s)

ρ_w et μ_w : masses volumiques (en kg/m³) et viscosité dynamique (en Pa.s) de l'eau pure à la température de la colonne

$D_{X,l}$ et $D_{X,g}$: coefficients de diffusion de l'espèce X en phases liquide et gazeuse (en m²/s). Ils sont supposés indépendants de z dans notre problème pour le CO₂.

σ : tension de surface (en N/m)

g : accélération de la gravité à la surface de la terre (en m/s²)

Tableau 4: Caractéristiques des fluides à la température de la colonne

| Grandeur | Notation | Valeur | Unité |
|---|----------|--------|-------------------|
| Masse volumique du liquide (<i>considérée indépendante de sa composition !</i>) | ρ_l | 1030,5 | kg/m ³ |
| Masse volumique de l'eau pure | ρ_w | 992,2 | kg/m ³ |
| Masse volumique du gaz à son entrée dans la colonne | ρ_g | 3,50 | kg/m ³ |
| Viscosité dynamique du liquide à son entrée dans la colonne | μ_l | 1,95 | mPa.s |
| Viscosité dynamique de l'eau pure | μ_w | 0,653 | mPa.s |
| Viscosité dynamique du gaz à son entrée dans la colonne | μ_g | 59,42 | μPa.s |
| Tension de surface | σ | 69,6 | mN/m |

Tableau 5: Corrélations pour l'accélération du transfert de matière en présence de réactions très rapides.

| Grandeur | Corrélation |
|---|---|
| Nombre de Hatta | $Ha(z) = \frac{\sqrt{\kappa c_{RNH_2}(z) D_{CO_2,l}}}{k_L}$ |
| Rapport des flux diffusifs des réactifs | $\mathcal{N}(z) = \frac{D_{MEA} c_{RNH_2}(z)}{v_{MEA} h_{CO_2} c_{CO_2}(z) D_{CO_2,l}}$ avec $v_{MEA} = 2$ |
| Facteur d'accélération | $E(z) = 1 + \frac{Ha(z)}{A_C(z)} \left(1 - \text{Exp} \left(-0.65 Ha(z) \sqrt{A_C(z)} \right) \right)$ avec $A_C(z) = \frac{Ha(z)}{\mathcal{N}(z)} + \text{Exp} \left(\frac{0.68}{Ha(z)} - 0.45 \frac{Ha(z)}{\mathcal{N}(z)} \right)$ |

avec

$c_{CO_2}(z)$: concentration molaire en CO₂ dans la phase gazeuse à la hauteur z dans la colonne (en mol/m³)

$c_{RNH_2}(z)$: concentration molaire en amine libre RNH₂ dans la phase liquide à la hauteur z dans la colonne (en mol/m³)

$D_{CO_2,l}$ et D_{MEA} : coefficients de diffusion du CO₂ et de la MEA en phase liquide (en m²/s). Ils sont supposés indépendants de z.

κ : constante cinétique de réaction du CO₂ avec RNH₂ (en m³/(mol s)), supposée indépendante de z

h_{CO_2} : constante de solubilité du CO₂ (sans dimension), supposée indépendante de z

v_{MEA} : coefficient stœchiométrique de réaction du CO₂ avec RNH₂ (sans dimension)

k_L : coefficient de transfert du côté de la phase liquide (en m/s)

Tableau 6: Corrélations pour les paramètres physico-chimiques du transfert.

| Grandeur | Notation | Unité | Corrélation |
|--|---------------------|----------------------|---|
| Coefficient de diffusion du CO ₂ en phase gazeuse | $D_{\text{CO}_2,g}$ | m ² /s | $6,55 \cdot 10^{-8} \sqrt{T}$ |
| Coefficient de diffusion du CO ₂ en phase liquide | $D_{\text{CO}_2,l}$ | m ² /s | $3 \cdot 10^{-5} \text{Exp}\left(-\frac{3096}{T}\right)$ |
| Coefficient de diffusion de la MEA en phase liquide | D_{MEA} | m ² /s | $\text{Exp}\left(-15 - \frac{2200}{T}\right)$ |
| Constante de solubilité du CO ₂ | h_{CO_2} | - | $1,5 \cdot 10^{-5} T \text{Exp}\left(\frac{1375}{T}\right)$ |
| Constante cinétique de réaction du CO ₂ avec RNH ₂ | κ | mol/m ³ s | $10^{7,9 - \frac{2152}{T}}$ |

avec

T : température absolue (en K)