

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE DE CONSTANTINE 3



FACULTE DE GENIE DES PROCEDES PHARMACETIQUES

DEPARTEMENT DE GENIE CHIMIQUE

N° d'ordre :

Série :

Mémoire de Master

Filière : Génie des Procédés

Spécialité : Génie Chimique

Modélisation de l'adsorption non
linéaire de Langmuir en lit fixe

Présenté par :

BECHLEM Randa

LADJABI Yasmina

HADADE Fares

Dirigé par:

M^{elle}. KOLLI Mounira

Année Universitaire : 2014/2015.

Session : juin

Résumé

Le but de ce mémoire de master est d'étudier la simulation des phénomènes d'advection et de dispersion de la concentration d'un polluant dans le cas d'adsorption non-linéaire (modèle de Langmuir), dans un milieu poreux chimiquement homogène en écoulement permanent unidimensionnel, donc la définition des paramètres comme les propriétés des milieux poreux, l'advection, la dispersion et l'adsorption sont nécessaires pour analyser et caractériser le processus. La modélisation numérique est l'outil mathématique à travers lequel nous avons réussi à résoudre notre problème où on a fait appel à des méthodes numériques telles que les volumes finis et les différences finis, à l'aide d'un programme de langage fortran.

Nos résultats montrent que la longueur de la colonne, les constantes de la cinétique et le débit influencent sur l'opération de l'adsorption d'un part, d'autre part les deux méthodes de discrétisation soit les différences finies soit les volumes finis ainsi que les deux méthodes de résolution analytique ou de Newton Raphson donnent les mêmes résultats.

Mots clés : Adsorption, Transport, Advection, Dispersion, Lit fixe, Langmuir

Sommaire

Liste des figures

Liste des tableaux

Nomenclature

Introduction Générale

Chapitre I : le milieu poreux

I.1.Introduction	01
I.2.Les milieux poreux	03
I.2.1.Définition	03
I.2.2.Propriétés des milieux poreux	04
I.2.2.1.Masse volumique sèche	04
I.2.2.2.Porosité	04
I.2.2.2.1.Porosité totale	05
I.2.2.2.2.Porosité cinématique	05
I.2.2.3.Surface spécifique	05
I.2.2.4.Perméabilité	06
I.2.2.5.La granulométrie	07
I.3.Ecoulement dans les milieux poreux (Loi de Darcy)	07
I.4.Hétérogénéité des milieux poreux	08
I.4.1.Hétérogénéité physique des milieux poreux	09
I.4.2.Hétérogénéité chimique des milieux poreux	09
I.5.Mécanismes de Transport en milieux poreux	09
I.5.1.Advection(ou convection)	09
I.5.2.Dispersion hydrodynamique	10
I.5.2.1.Diffusion moléculaire	11
I.5.2.2.Dispersion mécanique	11
I.6.Advection-dispersion	12

I.6.1.Equation d’advection-dispersion	12
I.6.2.Advection versus dispersion	13
Chapitre II : L’adsorption	
II.1.Introduction	15
II.2.Définition de l’adsorption	15
II.3.Type d’adsorption	16
II.3.1.Adsorption physique	16
II.3.2.Adsorption chimique	16
II.4.Les adsorbants	17
II.4.1.Le charbon actif	17
II.4.2.Les tamis moléculaires carbonés (CMS)	18
II.4.3.Le gel de silice	18
II.4.4.Les zéolithes	18
II.4.5. Alumines activées	18
II.5.Utilisation industrielle de l’adsorption	19
II.5.1.Séparations gazeuses	19
II.5.2.Séparations liquides	19
II.6.Equilibre d’adsorption	19
II.6.1.Modes de représentation	19
II.6.1.1.Les isothermes	20
II.7.Modèles mathématiques des isothermes d’équilibre	21
II.7.1.L’isotherme linéaire	22
II.7.2.L’isotherme de Langmuir	22
II.7.3.L’isotherme de Freundlich	23
II.8.Régénération ou « STRIPPING »	23
II.9.La cinétique d'adsorption	24
II.10.Procédés d’adsorption	25
II.10.1.Les procédés discontinus	25
II.10.2.Les procédés semi-continus	25
II.10.2.1.Adsorption en lit fluidisé	25
II.10.2.2.Adsorption sur concentrateur à roue	25

II.10.2.3.Adsorption en lit fixe	26
a-Définition	26
b-Les niveaux de porosité en lit fixe	27
c-Courbe de perçage	28
d-Utilisation de la courbe de percée	29
Chapitre III : Modélisation de l'adsorption en lit fixe	
III.1. Introduction	32
III.2. Description du problème	32
III.3. Hypothèses	32
III.4.Démonstration de l'équation mathématique	33
III.4.1.Equation du transport d'un soluté réactif	33
III.4.2. La condition initiale et les conditions aux limites	35
III.5. Réécriture de l'équation et des conditions sous forme adimensionnelle	35
III.5.1. Réécriture de l'équation	35
III.5.2. Réécriture des conditions	36
III.6. Les méthodes de résolution numérique de l'équation du transport	36
III.6.1. La résolution par la méthode des différences finies	37
III.6.1.1. Principe de la méthode des différences finies	37
III.6.1.2. Discrétisation du domaine	38
III.6.1.3. Discrétisation de l'équation différentielle	39
III.6.1.4. Discrétisation des conditions aux limites	40
III.6.2. La résolution par la méthode des volumes finis	40
III.6.2.1. Principe de la méthode des volumes finis	40
III.6.2.2. Discrétisation du domaine	41
III.6.2.3. Discrétisation de l'équation différentielle	42
III.6.2.4. Discrétisation des conditions aux limites	43
III.7. Résolution numérique	44
III.7.1. Méthode de Newton-Raphson	44
III.7.1. Méthode analytique	44
III.8. Les conditions de stabilité	45
III.9.Organigramme de résolution	45

Chapitre IV : Résultats et discussions

IV.1. Introduction	47
IV.2. Résolution par la méthode de différences finies	48
IV.2.1. Profil des concentrations (onde d'adsorption) dans le lit à un temps fixe	48
IV.2.2. Profil des concentrations (La courbe de rupture) en fixant la position	50
IV.2.3. Comparaison entre les deux méthodes de résolution	50
IV. 3. Comparaison entre les deux méthodes de discrétisation	50
IV.3.1. Profil des concentrations (onde d'adsorption) dans le lit à un temps fixe	50
IV.3.2. Profil des concentrations (courbe de rupture) dans le lit en fixant la position	51
IV.4. Effet des paramètres du modèle sur l'avancement de la courbe de percée	51
IV.4.1. Effet de la longueur de la colonne	51
IV.4.2. Effet de la concentration initiale	52
IV.4.3. Effet de débit volumique	53
IV. 4.4. Effet de la constante d'équilibre	53
IV.4.5. Effet de la quantité maximale adsorbée (S_{max})	54
IV.5. Exploitation des courbes de percées	55
IV.5.1. la capacité	55
IV.5.2. Efficacité	55
Conclusion général	57
Bibliographie	