

# Réunion de thèse

22 février 2013

# Points à discuter

- Résultats analytiques et modélisation
- Analyses ETP-W
- Jury de thèse et agenda
- Stagiaire
- Projet à l'UT Austin

# Résultats dégradation

- Présentation des résultats utiles à la construction du modèle

- Pour rappel :

$$r = k \cdot e^{-E_a/RT} \cdot [O_2]^a \cdot [CO_2]^b$$

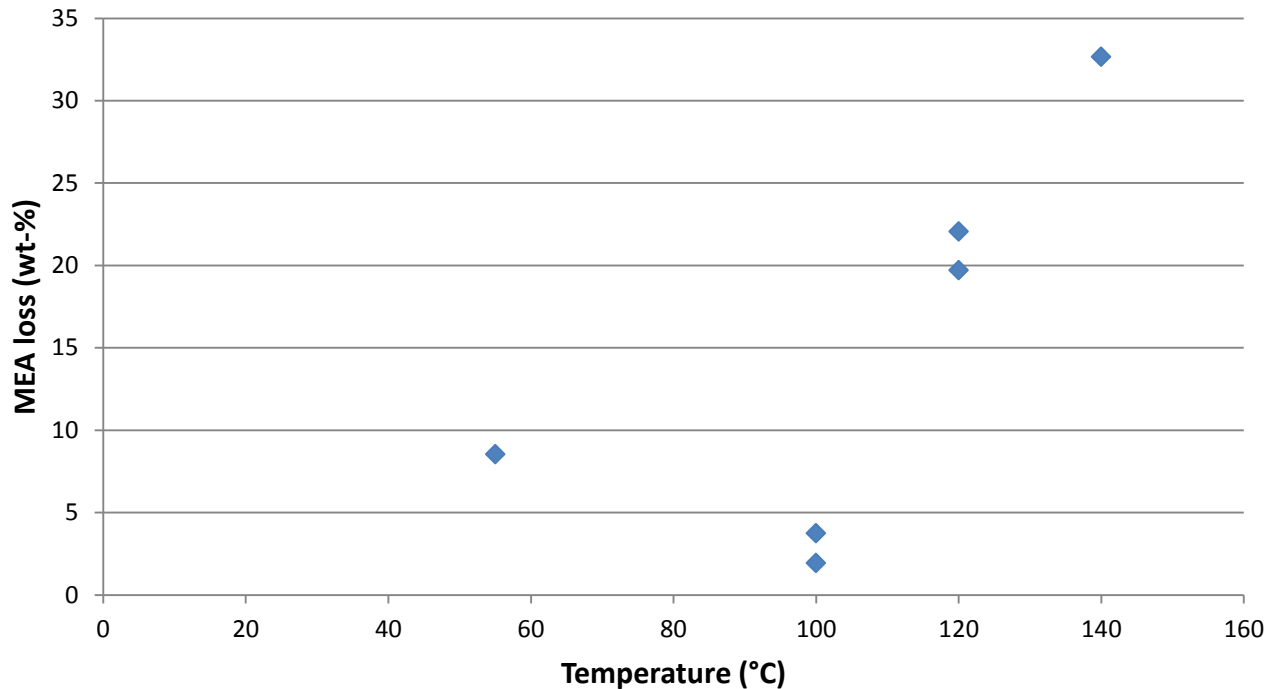
$$E_a: \ln r = \ln C_1 - E_a/RT \quad \text{avec } C_1 = k \cdot [O_2]^a \cdot [CO_2]^b$$

$$a: \ln r = \ln C_2 + a \cdot \ln [O_2] \quad \text{avec } C_2 = k \cdot [CO_2]^b \cdot e^{-E_a/RT}$$

$$b: \ln r = \ln C_3 + b \cdot \ln [CO_2] \quad \text{avec } C_3 = k \cdot [O_2]^a \cdot e^{-E_a/RT}$$

# Résultats dégradation

- Influence de la température



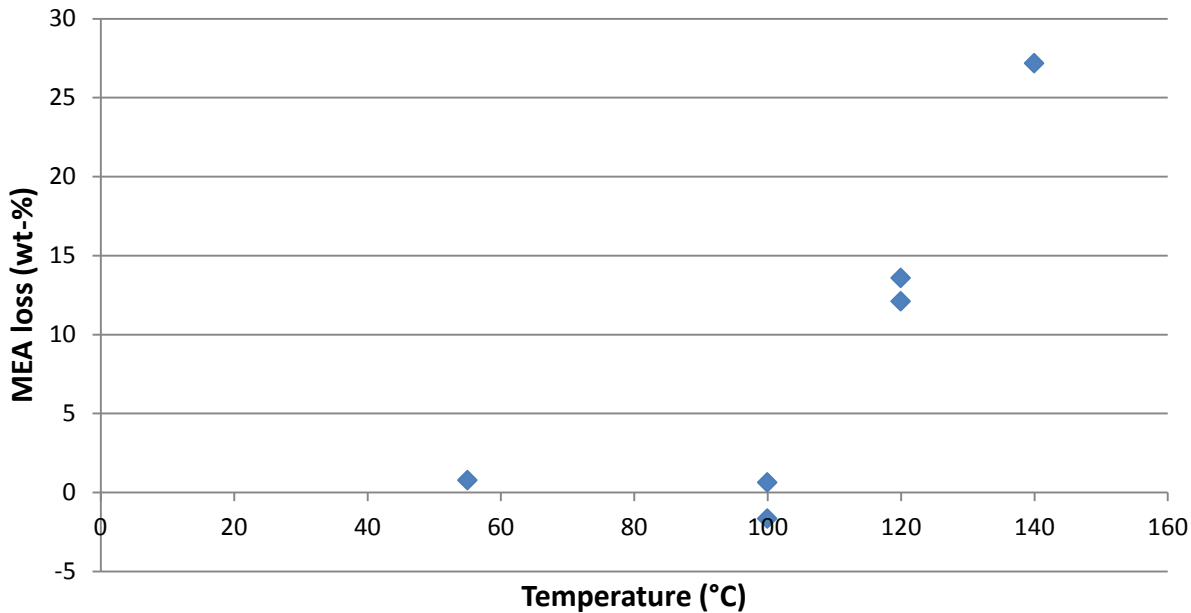
=> bonne répétabilité (erreur: 5-10%)

=> 2 effets: limitation physique à BT et chimique à HT

=> mais: degré de charge en CO<sub>2</sub> pas considéré

# Résultats dégradation

Si on considère la solution chargée:



Profil différent!

Température	P20	P32	P30	P17	P34	P19
°C	55	100	100	120	120	140
T0	28.72	28.97	28.26	28.30	29.68	28.80
T1	26.47	28.07	27.26	25.10	27.57	26.64
1-week degradation	26.27	27.89	27.71	22.06	23.83	19.4
% dégradation T0	8.52	3.73	1.94	22.05	19.71	32.64
% dégradation T1	0.77	0.63	-1.66	12.10	13.57	27.18

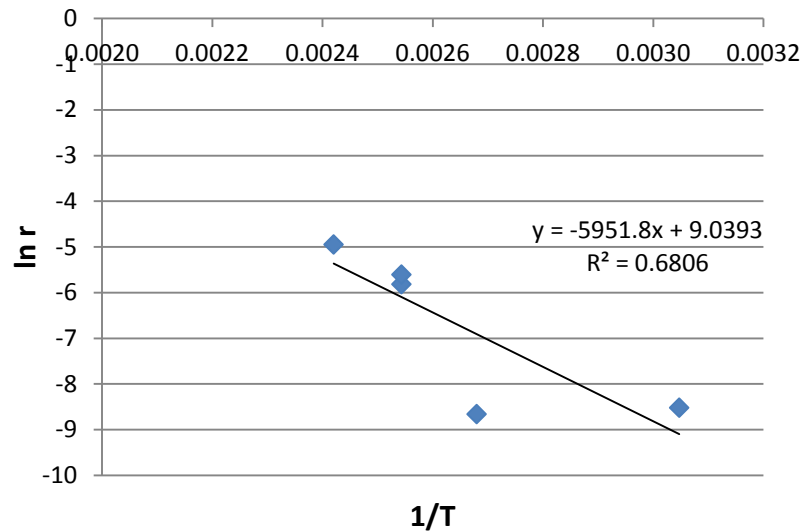
- À 55°C : peu de désorption du CO<sub>2</sub>
- À 120°C : CO<sub>2</sub> désorbé
- À 100°C : => charge intermédiaire

Temperature	P20	P32	P30	P17	P34	P19
°C	55	100	100	120	120	140
T0	28.72	28.97	28.26	28.30	29.68	28.80
T1	26.47	28.07	27.26	25.10	27.57	26.64
1-week degradation	26.27	27.89	27.71	22.06	23.83	19.4
% dégradation T0	8.52	3.73	1.94	22.05	19.71	32.64
% dégradation T1	0.77	0.63	-1.66	12.10	13.57	27.18

- => analyses C et N à l'ETP-W?

# Effet de la température

- Un seul régime identifié, exponentiel (Arrhenius)



$E_a \sim 49.5$  kJ/mol (46.9)

Uyanga, 2007: 45.3 kJ/mol

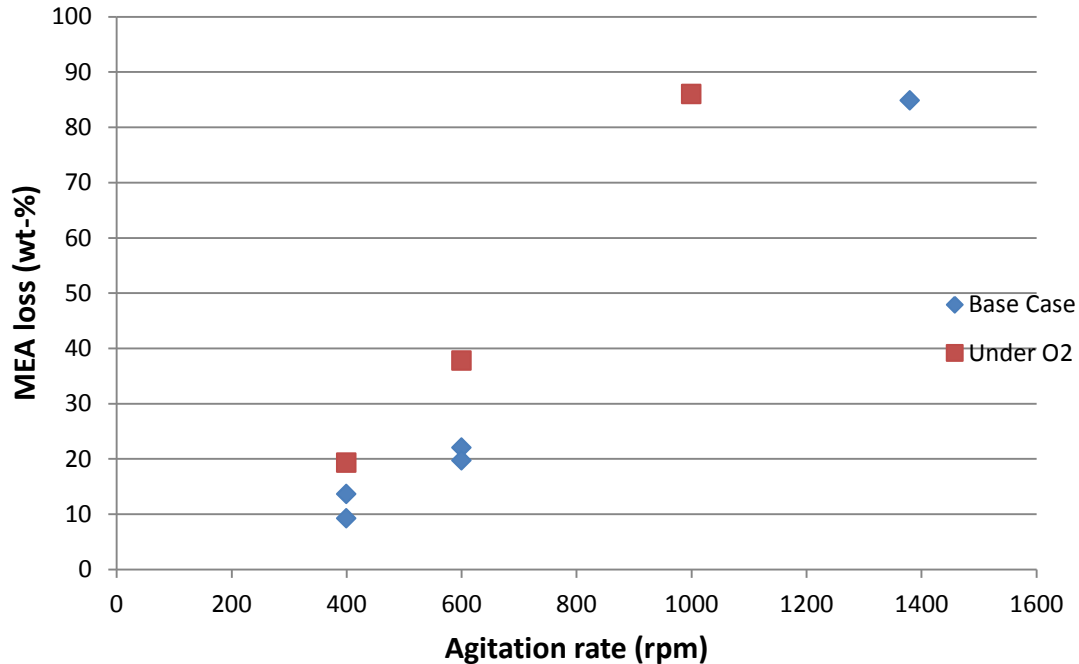
Supap, 2009: 29.4 kJ/mol

Mais:

- Pas de dégradation à 55°C => limitation de transfert d'O<sub>2</sub>?
- Seul le régime cinétique chimique a été évalué?

# Effet de la vitesse d'agitation

- Limitation de transfert physique: tests à 120°C

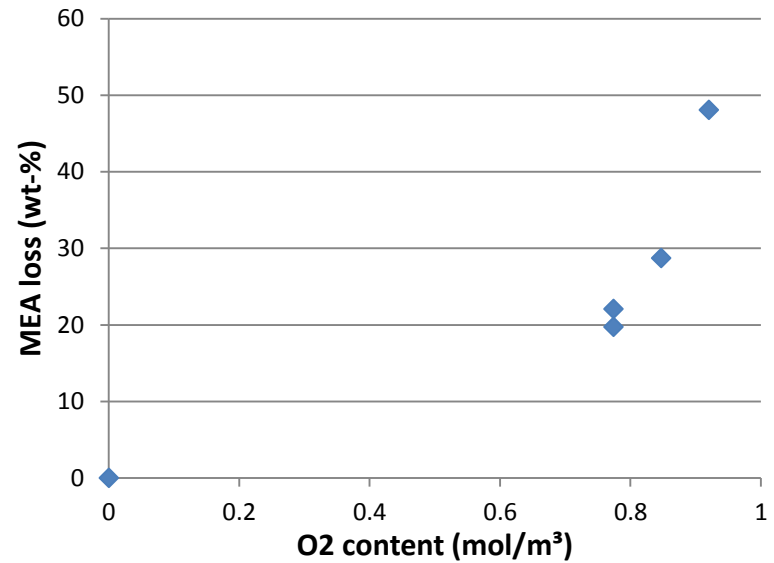
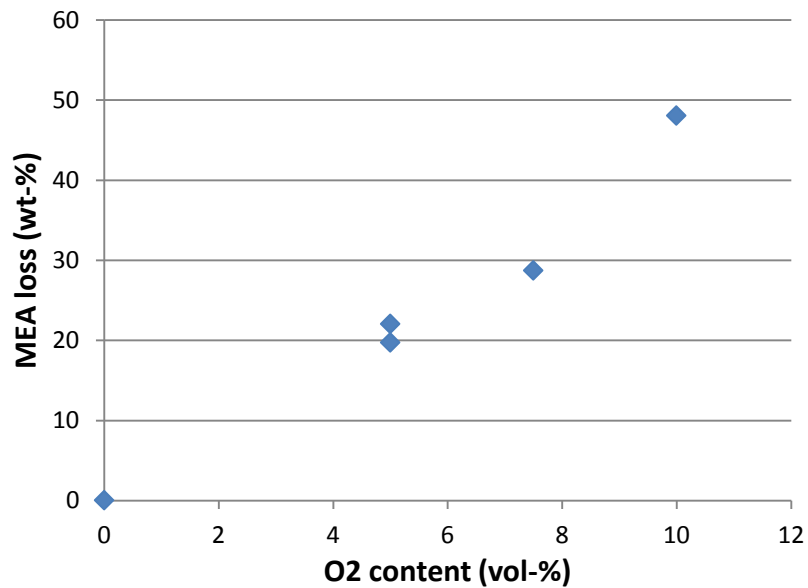


=> Limitation due au transfert d'O<sub>2</sub>: Faut-il la prendre en compte dans le modèle? Ou correspond-elle à une configuration donnée?



# Résultats dégradation

- Influence  $O_2$ :  $r = C_2 \cdot [O_2]^a$

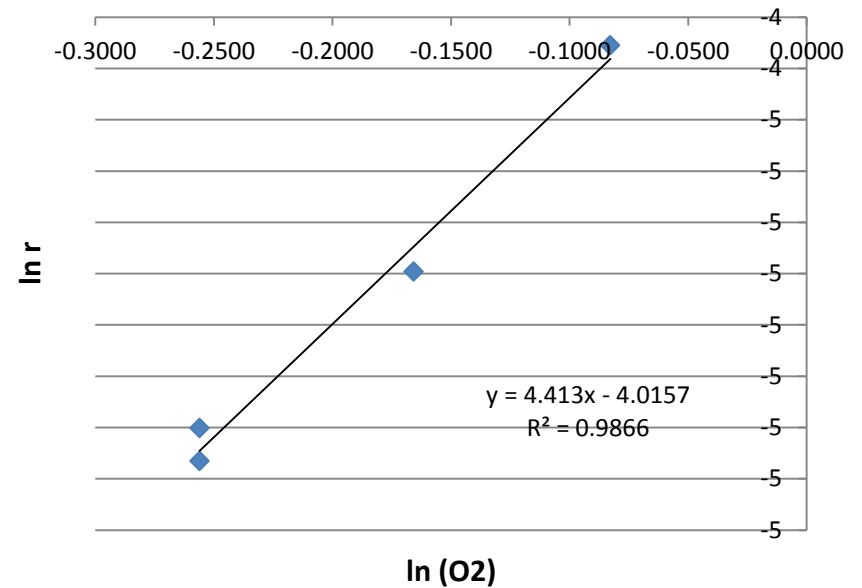
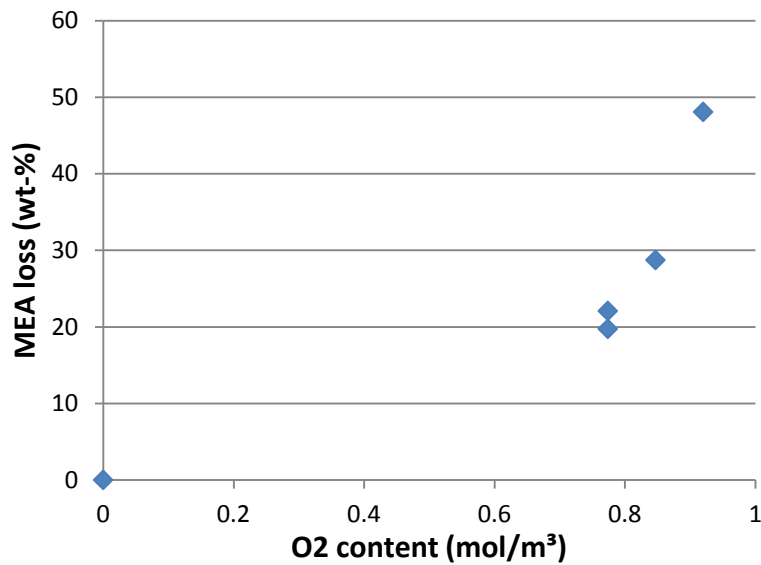


Avec  $[O_2]$  en mol/m<sup>3</sup> ou en mol – gamma?

Équation de solubilité d'O<sub>2</sub> => O<sub>2</sub> bullé dans la solution.

# Résultats dégradation

- Influence O<sub>2</sub>:  $r = C_2 \cdot [O_2]^a$



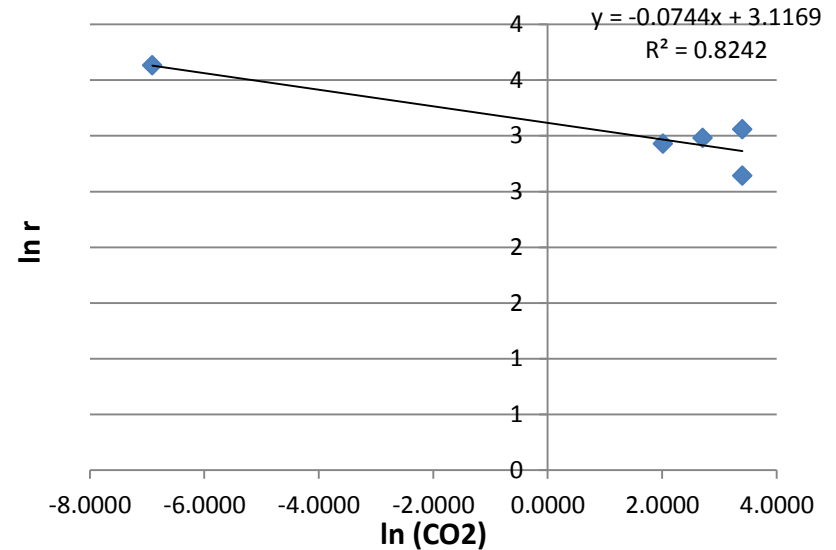
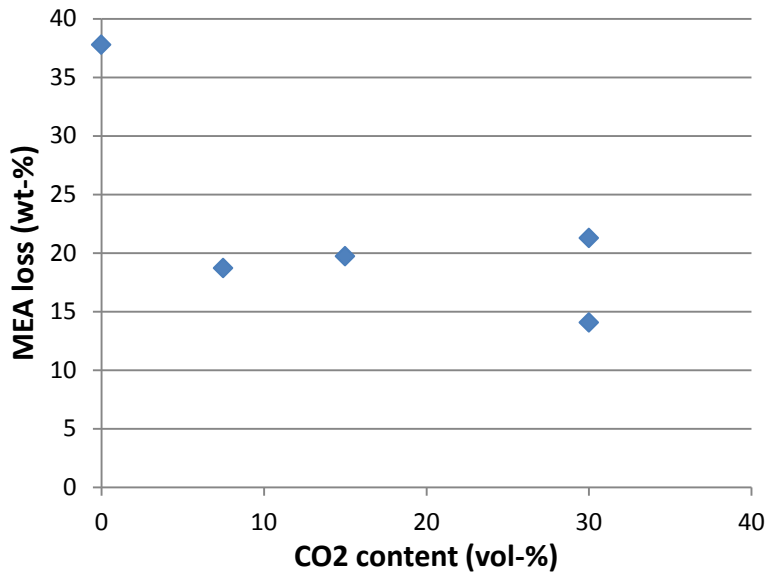
=>  $a = 4.4$

Uyanga, 2007:  $a = 3.4$

Supap, 2009:  $a = 2.9$

# Résultats dégradation

- Influence CO<sub>2</sub>



Influence faible à partir de quelques pourcents

$b = -0.074$

Uyanga, 2007:  $b = -0.33$

Supap, 2009:  $b = 0.18$

$$-r_{\text{MEA}} = \frac{k_0 e^{-E_a/RT} [\text{MEA}]^a ([\text{O}_2]^b + [\text{SO}_2]^c)}{1 + k[\text{CO}_2]^d}$$

- $r = k \cdot e^{-E_a/RT} \cdot [O_2]^a \cdot [CO_2]^b$

Avec  $E_a = 49.5 \text{ kJ/mol}$

$$a = 1.16$$

$$b = -0.074$$

Mais il faut encore trouver comment convertir  $P_{CO_2}$  en  $[CO_2]$ !

⇒ Directement implémentable dans Aspen Plus (avec prise en compte ou non des activités)

# Analyses C et N à l'ETP-W

- 60€/échantillon
- MEA 30% non chargée:
  - En théorie: 6.88% de N; 11.8% de C
  - Mesurée: 6.48% de N; 11.73% de C
- MEA dégradée P34 Tf:
  - En théorie: 5.47% de N; 9.38% de C
  - Mesurée: 5.46% de N; 12.55% de C
- MEA dégradée P11 Tf
  - En théorie: 0.92% de N; 1.58% de C
  - En pratique: 3.83% de N; 9.16% de C

# Points à discuter

- Jury de thèse et agenda
- Stagiaire
- Projet à l'UT Austin:
  - Développement et validation du modèle
  - Tests à plus grande échelle