

Département de génie des procédés

Master 1 en génie chimique

Cours Simulateurs en génie des procédés 2022

En général, les ingénieurs de procédés chimiques s'occupent de deux types de tâches : conception d'un nouveau procédé et simulation d'un processus existant. Ces tâches peuvent être simples ou très complexe. Pour résoudre quelques problèmes simples, calculez à la main peut être utilisé. L'avantage du calcul manuel est une connaissance plus approfondie du problème. Cependant, dans un problème, la solution de plusieurs milliers d'équations est souvent nécessaire. Par conséquent, le calcul manuel de ces problèmes en temps réel est pratiquement impossible et le processus les simulateurs sont un outil irremplaçable. À la fois la conception et les tâches de simulation nécessitent des approches spécifiques. Un produit chimique la conception de processus commence par une exigence pour un produit et passe par différentes étapes de conception. Une simulation la tâche commence par une exigence de modification de processus ou l'optimisation et se poursuit par une analyse de l'existant état de l'art.

La conception et la simulation par ordinateur testent et ajustent en temps réel les produits dans un environnement virtuel proche des contraintes réelles de production. La simulation de procédés permet aux industriels d'une part d'améliorer l'efficacité et la rentabilité d'un procédé existant et d'autre part de concevoir et de simuler une nouvelle unité de production.



Figure 1 Unités d'ammoniac

Définition de la simulation

La simulation est définie comme étant la représentation d'un phénomène physique à l'aide de

Département de génie des procédés

Master 1 en génie chimique

modèles mathématiques simples permettant de décrire son comportement. Autrement dit, la simulation permet de représenter par des modèles mathématiques les différents phénomènes de transfert de masse, d'énergie et de quantité de mouvement qui se produisent dans les différentes opérations unitaires.

Principes de fonctionnement et rôle des simulateurs

Les simulateurs de procédés utilisés classiquement dans l'industrie, peuvent être considérés comme des modèles de connaissance. Ils sont basés sur la résolution de bilans de masse et d'énergie, des équations d'équilibres thermodynamiques,...etc, et sont à même de fournir l'information de base pour la conception. Ils sont principalement utilisés pour la conception de nouveaux procédés (dimensionnement d'appareil, analyse du fonctionnement pour différentes conditions opératoires, optimisation), pour l'optimisation de procédés existants et l'évaluation de changements effectués sur les conditions opératoires. Avant même de parler de modèles d'opération de transformation de la matière, il faut des modèles pour prédire les propriétés physiques de la matière. C'est pourquoi ces simulateurs disposent tous d'une base de données thermodynamiques contenant les propriétés des corps purs (masse molaire, température d'ébullition sous conditions normales, paramètres des lois de tension de vapeur, ...).

Cette base de données est enrichie d'un ensemble de modèles thermodynamiques permettant d'estimer les propriétés des mélanges.

Tout simulateur industriel de procédés chimiques est organisé autour du module suivant :

- Une base de données des corps purs et un ensemble de méthodes pour estimer les propriétés des mélanges appelés aussi modèles thermodynamiques.
- Un schéma de procédé permettant de décrire les liaisons entre les différentes opérations unitaires constituant l'unité (PFD pour Process Flow Diagram).
- Des modules de calcul des différentes opérations unitaires contenant les équations relatives à leur fonctionnement : réacteur chimique, colonne de distillation, colonne de séparation, échangeurs de chaleur, pertes de charges, etc.
- Un ensemble de méthodes numériques de résolution des équations des modèles.
- Avec ce type de logiciel, les ingénieurs peuvent à partir de la donnée des corps purs présents dans le procédé et du schéma de procédé, développer un modèle du processus reposant sur la mise en commun des équations décrivant les différentes opérations unitaires, les réactions
- chimiques, les propriétés des substances et des mélanges, qui puisse aussi communiquer avec d'autres applications comme Excel, Visual Basic et Matlab,...

Département de génie des procédés

Master 1 en génie chimique

Les P&ID (Piping and Instrumentation Diagram)

Un schéma tuyauterie et instrumentation (en anglais Piping and instrumentation diagram ou Process and instrumentation diagram, abrégé P&ID) est un diagramme qui définit tous les éléments d'un procédé industriel. Il est le schéma le plus précis et le plus complet utilisé par les ingénieurs pour la description d'un procédé. Il se distingue du schéma de procédé par l'ajout des éléments de contrôle, les armatures, les détails sur l'isolation et la protection des installations et la position coordonnées des installations les unes par rapport aux autres. Les installations ainsi que les vannes et les éléments de contrôle sont décrits par des symboles.

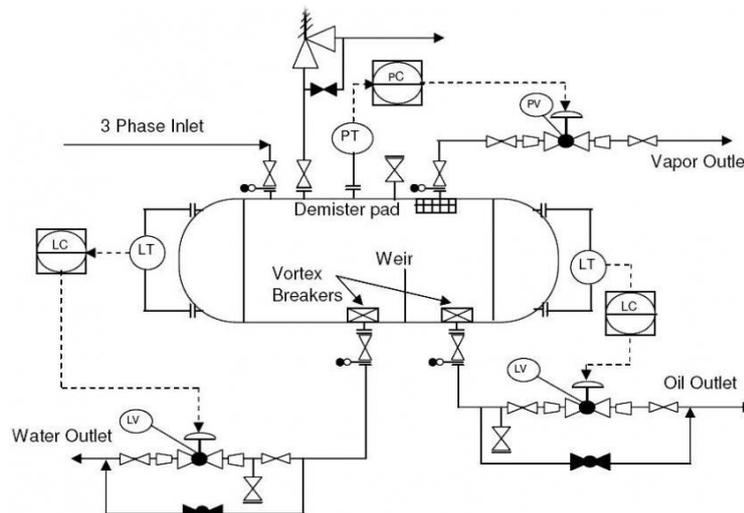


Figure 3 Piping and Instrumentation Diagram (P&ID)

Modes de fonctionnement des simulateurs

Il y a deux modes de fonctionnement dans un simulateur : statique (ou stationnaire) et dynamique. Les simulateurs statiques résolvent des équations statiques qui traduisent le fonctionnement en régime permanent (à l'équilibre), tandis que les simulateurs dynamiques permettent d'évaluer l'évolution des variables dans le temps à partir de la résolution de systèmes d'équations différentielles. Les simulateurs industriels sur la thermodynamique les plus connus mondialement sont :

- Statiques : ASPEN PLUS (Aspen Technologies), Design II de (WinSim), HYSYS (Hyprotech), PRO/II (Simulation Sciences), PROSIM
- Dynamiques : HYSYS (Hyprotech), ASPEN DYNAMICS (Aspen Technologies), Design II de (WinSim), DYMSYM (Simulation Sciences Inc.)

Département de génie des procédés

Master 1 en génie chimique

Les simulateurs dynamiques sont en passe de se substituer aux simulateurs en régime permanent. Par exemple, HYSYS (Hyprotech) peut passer de la simulation d'un régime permanent à celle d'un régime transitoire (dynamique) par un seul « click » sur un bouton.

Tout procédé ne peut être simulé à l'aide de ces simulateurs industriels. En effet, dans le cas de la mise au point de nouveau procédé, il est généralement nécessaire de disposer de son propre simulateur. Le concept est le même : sur la base des propriétés thermodynamiques des corps purs impliqués dans l'opération et des modèles thermodynamiques, il y a résolution des équations de bilan de matière et d'énergie et des relations d'équilibre constituant le modèle. La différence vient du fait que généralement seules les propriétés des corps présents dans le procédé chimique considéré ne sont pas détaillées et que l'environnement de développement est moins convivial. On parlera de simulateur dédié (spécifique à un procédé donné). Il a l'avantage de pouvoir avoir une totale maîtrise sur la façon d'écrire les équations du modèle et de les résoudre.

Il existe plusieurs logiciels de simulation des procédés chimiques sur le marché. On présente ci-après une liste non exhaustive des logiciels les plus utilisés au niveau mondial: Parmi les logiciels de simulation les plus connue en trouvent Aspen HYSYS.

Qu'est-ce que l'Aspen HYSYS Aspen ?

HYSYS est un logiciel de simulation et de conception d'usines de traitement. Il est conçu par la société canadienne Hyprotech, fondée par des chercheurs de l'Université de Calgary, HYSYS V1.1 publié en 1996. En mai 2002, AspenTech a acquis et modifié Hyprotech, dont HYSYS. Le tableau 1 présente les logiciels spécialisés en génie chimique.

Département de génie des procédés

Master 1 en génie chimique

Tableau 1 Les logiciels spécialisés en génie chimique.

Name	Source	Type	Web site
Aspen Plus	Aspen Technology Inc. Ten Canal Park Cambridge, MA 02141-2201, USA	Steady state	www.aspentech.com
Aspen Dynamics	Aspen Technology Inc. Ten Canal Park Cambridge, MA 02141-2201, USA	Dynamic	www.aspentech.com
Aspen HYSYS	Aspen Technology Inc. Ten Canal Park Cambridge, MA 02141-2201, USA	Steady state and dynamic	www.aspentech.com
PRO/II and dynamic	SimSci-Esscor 5760 Fleet Street Suite 100, Carlsbad CA 92009, USA	Steady state and dynamic	www.simscl.com
UniSim Design	Honeywell 900-250 York Street London, Ontario N6A 6K2, Canada	Steady state and dynamic	www.honeywell.com
CHEMCAD	Chemstation Inc. 2901 Wicrest, Suite 305 Houston TX 77251-1885, USA	Steady-state	www.chemstations.net
DESIGN II	WinSim Inc. P.O.Box 1885 Houston, TX 77251-1885, USA	Steady state	www.winsim.com
gPROM	PSE Process Systems Enterprise Limited 26-28 Hammersmith Grove London W6 7HA United Kingdom	Steady state	https://www.psenterprise.com

Modélisation mathématique

Un modèle mathématique est composé d'une série d'équations développées dans l'objectif de décrire le comportement d'un système donné (opération unitaire : séparation de phases, fractionnement de composants, compression, détente, échange de chaleur ou autre). Ce sont des équations de conservation de masse, d'énergie et de quantité de mouvement. Ces équations peuvent être algébriques ou différentielles.

Utilisation du simulateur

Le simulateur peut être utilisé lors de la conception d'un procédé industriel afin de :

- Etablir des bilans de matière et d'énergie d'un procédé industriel.

Département de génie des procédés

Master 1 en génie chimique

- Dimensionner les équipements de ce procédé.
- Ou bien dans le suivi des procédés qui sont déjà installés afin de :
- Réajuster les paramètres de fonctionnement dans le cas de changement de compositions de l'alimentation ou des conditions de fonctionnement de certains équipements.
- Déterminer les performances des équipements.

Types de modèles

- Équations différentielles représentant les bilans de matière, d'énergie et de quantité de mouvement
- Empiriques (coefficients de transfert de chaleur et de matière, facteurs de friction, la plupart des modèles thermodynamiques, etc.)

Résolution statique et dynamique des modèles (simulation)

- Variété d'algorithmes numériques pour la résolution des systèmes d'équations différentielles
- Algorithme d'optimisation.
- Etc.

Département de génie des procédés

Master 1 en génie chimique

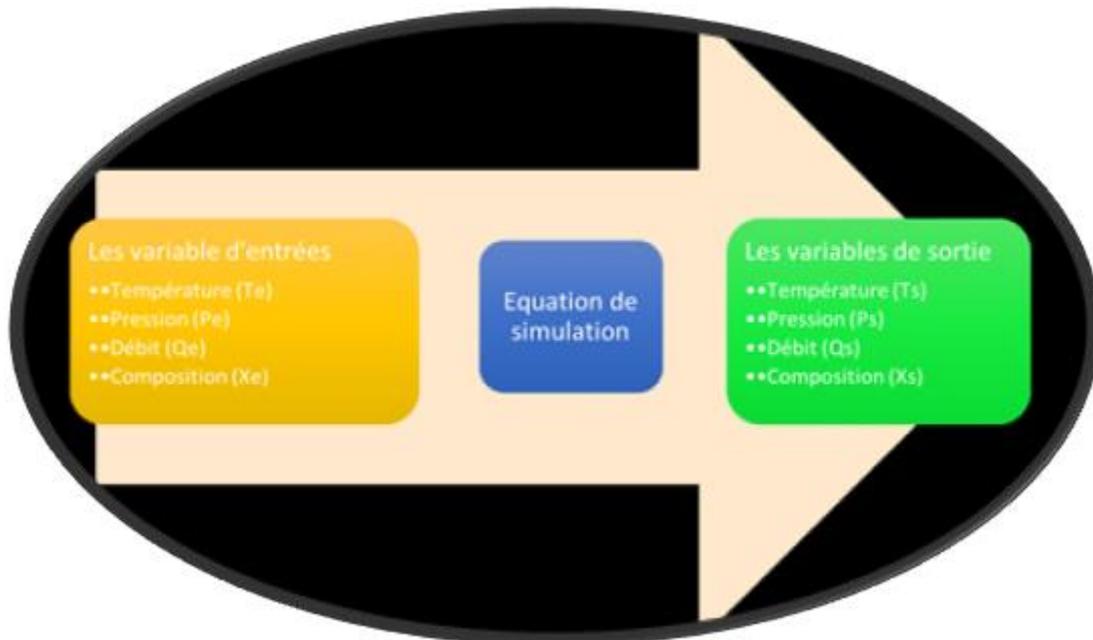


Figure 4 Les variables d'états.

Simulateurs commerciaux

Le simulateur peut être utilisé lors de la conception d'un procédé industriel afin de :

- Établir des bilans de matière et d'énergie d'un procédé industriel.
- Dimensionner les équipements de ce procédé.

Ou bien dans le suivi des procédés qui sont déjà installés afin de :

- Réajuster les paramètres de fonctionnement dans le cas de changement de compositions de l'alimentation ou des conditions de fonctionnement de certains équipements.
- Déterminer les performances des équipements.

Département de génie des procédés

Master 1 en génie chimique

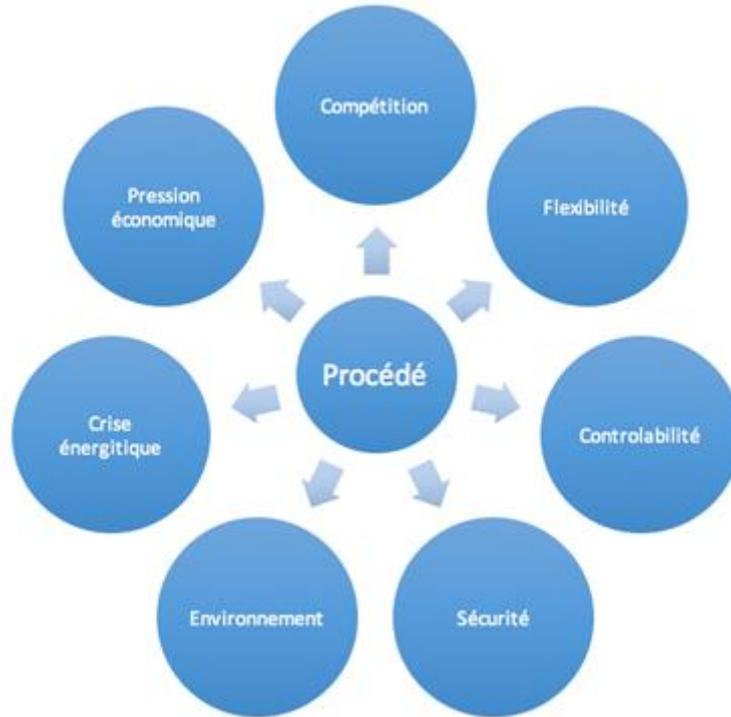


Figure 5 Les avantages en simulation des procédés.

Eléments constitutifs d'un simulateur de procédés

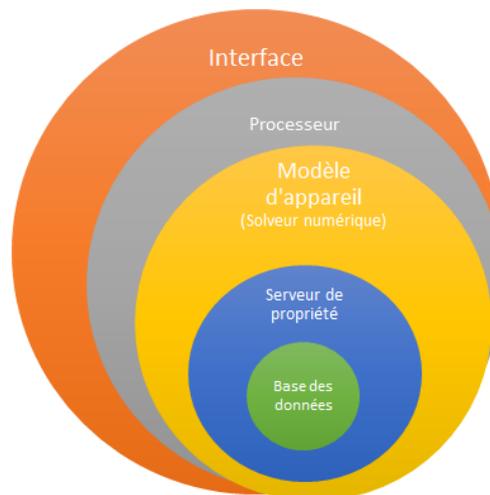


Figure 6 Eléments d'un simulateur de procédés.

Département de génie des procédés

Master 1 en génie chimique

Base de données

Parmi les bases de données de référence :

- Base DIIPR, environ 15000 espèce chimique et 50000 propriétés de mélange.
- DECHEMAR : 14000 équilibre Liq-Vap 28 point azéotrope, 5600 équilibre Liq-Liq 28500 coefficients d'activité, 5250 solubilité des gaz.
- *Serveur de propriété*

Contient les modèles thermodynamiques, les corrélations et permet de choisir le modèle approprié.

- *Modèle d'un appareil*

Équation de bilan matière, Eq de bilan thermique 10 mille équation non linéaire Eq de bilan constitutif.

- *Le processeur est le cerveau de l'ordinateur*

C'est lui qui organise les échanges de données entre les différents composants

- *Interface*

L'ordinateur affichant les résultats.

Les différentes approches utilisées pour le calcul dans le simulateur

Approche modulaire séquentielle classique

Cette approche suit le flux de charge dans les unités. (Simulation pure). C'est la méthode la plus inductive, la résolution des équations des unités des modules se fait au sein des modules même alors que les équations de recyclage et de spécification sont résolues séparément.

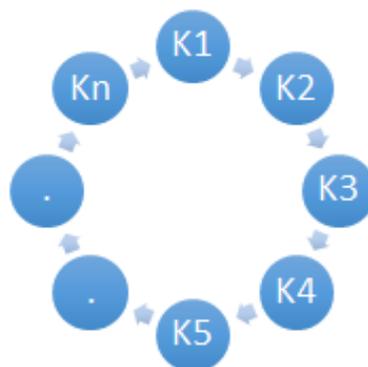


Figure 7 Approche modulaire séquentielle classique.

Département de génie des procédés

Master 1 en génie chimique

Approche globale

Utilisé pour l'optimisation, elle sert à la résolution instantané d'ensemble d'équations d'algorithme linéaire. Toutes les équations sont résolues simultanément par rapport a l'ensemble des variables (inconnu), cette méthode résolu simultanément la totalité des schémas dans un seul.

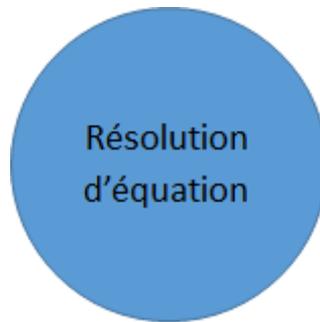


Figure 8 Approche globale.

Approche hybride

C'est une approche modulaire simultané concerne le concept de module, elle s'approprie la rapidité de convergence de l'approche orienté équation. (Problème de conception).

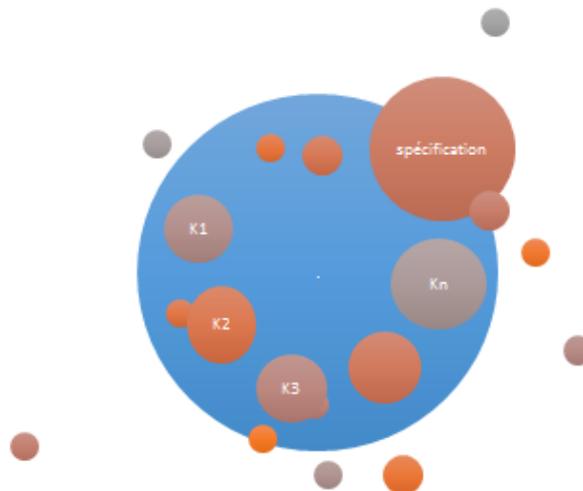


Figure 9 Approche hybride.

Département de génie des procédés

Master 1 en génie chimique

Simulateurs orientés module et orientés équation

L'aspect fondamental pour la simulation des procédés est l'identification des composants élémentaires dont l'assemblage permet de construire le modèle du procédé. Au niveau conceptuel, et comme conséquence directe au niveau numérique, deux approches s'opposent : l'approche dite « orientée module » (OM) et l'approche dite « orientée équation » (OE).

L'approche OM a été adoptée par la majorité des simulateurs commerciaux. Citons les plus largement utilisés : Aspen Plus, Chemcad, Aspen HYSYS, et Pro-Sim Plus.

Dans l'approche OM, l'élément de base pour construire le modèle du procédé est le modèle d'opération unitaire appelé « module ». Cette approche correspond à la vision classique et naturelle du procédé qui résulte de l'agencement d'opérations unitaires dédiées à une fonction précise telle que réaction ou séparation. L'utilisateur sélectionne les modules élémentaires standardisés à partir de la bibliothèque du simulateur, fournit leurs paramètres de fonctionnement et de dimensionnement et les relie entre eux par des courants représentant les flux de matière, d'énergie et d'information circulant entre les appareils du procédé réel. Le procédé est alors vu comme un graphe orienté dont les nœuds sont les modules et les arcs les courants. La simulation est réalisée par appel séquentiel des modules suivant une liste de calcul qui respecte le sens de circulation des fluides dans le procédé.

À l'opposé, les simulateurs OE, tels qu'Aspen Dynamics ou PROMS, sont spécifiquement dédiés à la simulation dynamique des procédés. Ces simulateurs apparaissent avant tout comme des solveurs de systèmes d'équations algébriques et différentielles intégrés dans un environnement offrant un langage de modélisation avancé. Ils sont d'ailleurs réputés plus efficaces sur le plan numérique, car basés sur une approche globale au niveau de la résolution. Par contre, les bibliothèques de modèles de ces simulateurs ne peuvent satisfaire totalement la diversité technologique ; à charge de l'utilisateur de jouer le rôle de modélisateur en codant le modèle spécifique de son procédé. Dans l'approche OE, l'élément...

Département de génie des procédés

Master 1 en génie chimique

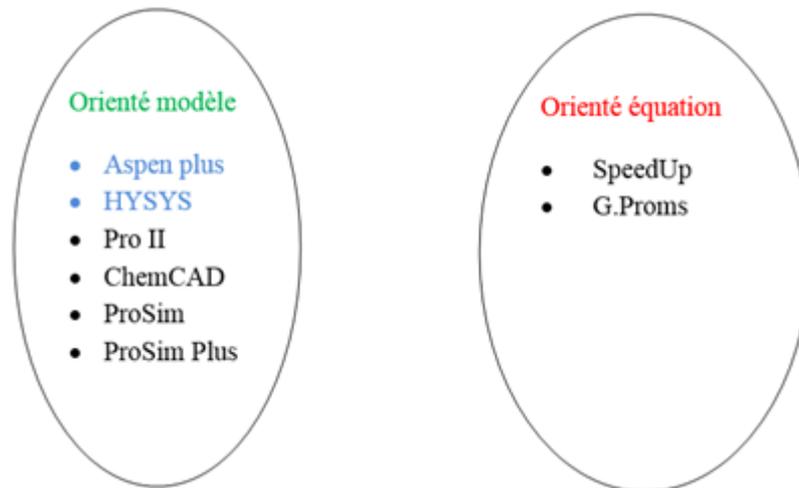


Figure 10 Catégories de simulateur.

Modélisation et simulation

- La modélisation est l'acte de construire un modèle (pompe, compresseur, vanne ect.)
- Une simulation est le processus d'utilisation d'un modèle pour étudier le comportement et les performances d'un système réel ou théorique.
- Dans une simulation, les modèles peuvent être utilisés pour étudier les caractéristiques existantes ou proposées d'un système.
- But de la modélisation et de la simulation
- Résout les problèmes du monde réel de manière sûre et efficace
- Fournit une méthode d'analyse importante qui est facilement vérifiée, communiquée et comprise.
- Fournit des solutions précieuses en donnant un aperçu clair des systèmes complexes.
- Environnement sans risque

Il fournit un moyen sûr de tester et d'explorer différents scénarios (et si). L'effet du changement des niveaux de personnel dans une usine peut être vu sans mettre la production en danger. Prenez la bonne décision avant de faire des changements dans le monde réel.

Département de génie des procédés

Master 1 en génie chimique

- Économisez du temps et de l'argent

Les expériences virtuelles avec des modèles de simulation sont moins coûteuses et prennent moins de temps que les expériences avec des actifs réels. Les campagnes marketing peuvent être testées sans alerter la concurrence ni dépenser inutilement de l'argent.

- Visualisation

Les modèles de simulation peuvent être animés en 2D/3D, ce qui permet de vérifier, communiquer et comprendre plus facilement les concepts et les idées. Les analystes et les ingénieurs gagnent en confiance dans un modèle en le voyant en action et peuvent clairement démontrer les résultats à la direction.

- Aperçu de la dynamique

Contrairement aux analyses basées sur des feuilles de calcul ou des solveurs, la modélisation par simulation permet d'observer le comportement du système dans le temps, à n'importe quel niveau de détail. Colonne de distillation Dynamique avec changement de débit/composition d'alimentation.

- Précision accrue

Un modèle de simulation peut capturer beaucoup plus de détails qu'un modèle analytique, offrant une précision accrue et des prévisions plus précises. Cependant, la précision est liée à la bonne solution de simulation.

Concepts et caractéristiques du simulateur HYSYS

Concepts de base du simulateur HYSYS

HYSYS est un logiciel de simulation interactif intégrant la gestion d'événements (« Event driven ») : c'est-à-dire qu'à tout moment, un accès instantané à l'information est possible, de même que toute nouvelle information est traitée sur demande et que les calculs qui en découlent s'effectuent de manière automatique. Non seulement toute nouvelle information est traitée dès son arrivée mais elle est propagée tout au long du Flowsheet.

Dans ce qui suit, on définit les principaux concepts de base et vocabulaires associés, qui sont utilisés pendant les étapes de construction d'un modèle dans le simulateur HYSYS.

- « Flowsheet » : c'est un ensemble d'objets « FlowsheetElements » (courants de matière, d'énergie, d'opérations unitaires, de variables opératoires) qui constituent tout

Département de génie des procédés

Master 1 en génie chimique

ou une partie du procédé simulé et qui utilisent la même base de données thermodynamique « FluidPackage ».

- Fluid Package: il permet de définir les composants chimiques présents dans le procédé simulé et leur affecte les propriétés chimiques et physiques contenues dans la base de données des corps purs.

Il permet aussi de définir les modèles thermodynamiques qui seront utilisés pour le calcul des propriétés des mélanges et de définir les cinétiques des réactions chimiques mises en jeu dans le procédé.

- Process Flow Diagram: ce diagramme permet de visualiser les courants et les opérations unitaires, représentées par des symboles dans le « Flowsheet », ainsi que la connectivité entre les courants, les opérations unitaires et les tableaux des propriétés des courants.
- Workbook : il permet d'avoir accès à l'information sur les courants et les opérations unitaires sous forme de tableau de données.
- Desktop: c'est l'espace principal de HYSYS pour visualiser les fenêtres lors de la conception.
- Propertyview : il contient l'information décrivant un objet (opération ou courant)
- Simulation Case (fichier de simulation) : c'est l'ensemble des FluidPackage, Flowsheets et

Flowsheet Elements qui constituent le modèle.

Environnement de simulation

Il existe 5 environnements de développement pour manipuler et mettre en forme l'information dans le simulateur :

Environnement « **Basis Manager** »: cet environnement permet de créer et modifier le « Fluid Package ».

Environnement « **OilCharacterization** »: il est utilisé pour caractériser les fluides de type pétrolier

Environnement « **Main Flowsheet** »: il permet de définir la topologie du Flowsheet principal de la simulation. Il est utilisé pour placer et définir les différents courants, opérations unitaires et « Sub-Flowsheets » qui constituent le procédé simulé.

Département de génie des procédés

Master 1 en génie chimique

Lorsque le système réel que l'on souhaite observer devient trop complexe et que de nombreuses variables sont en jeu, la modélisation intervient pour prendre en charge et traiter les problèmes : un modèle est élaboré pour essayer de rendre compte de la complexité du système tout en essayant de réduire le nombre de paramètres.

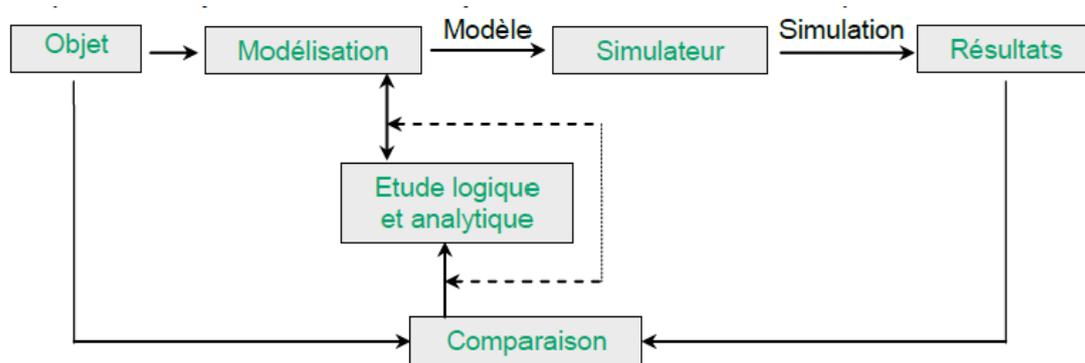


Figure 11 Logigramme pour la modélisation et la simulation d'un processus.

L'analyse du système, la modélisation et la simulation constituent les trois étapes fondamentales de l'étude du comportement dynamique des systèmes complexes (procédé) : L'analyse du système consiste à définir les limites du système à modéliser, à identifier les éléments importants ainsi que les types de liaison et d'interaction entre ces éléments et à les hiérarchiser.

La modélisation vise à représenter de la meilleure façon possible un objet réel par un ou des modèles sous forme mathématique. D'une manière générale, lors de l'élaboration du modèle, trois types de données sont nécessaires :

- les paramètres chimiques (réactions, produits formés, cinétiques et mécanismes),
- les paramètres de transfert (matière, énergie, quantité de mouvement),
- l'hydrodynamique caractérisant les équipements.

La simulation étudie le comportement d'un système. Elle permet, en particulier, d'étudier l'évolution du système en faisant varier un ou plusieurs facteurs et en confrontant les valeurs calculées aux valeurs observées.

Département de génie des procédés

Master 1 en génie chimique

Généralité sur la conception assistée par ordinateur (CAO)

La conception assistée par ordinateur est en résumé constituée par les étapes discutées plus haut, chaque domaine scientifique possède ses propres logiciels de la CAO. En génie des procédés, la CAO regroupe un bon nombre de simulateurs qui passe de la spécialisation aux simulateurs de procédés robuste et efficace dont peut citer : Aspen plus, Hysys, Chemcad, Prosim etc... Grace à la CAO des simulations virtuelles peuvent être faite avant de procéder à la réalisation d'un procédé. Cette technique est particulièrement intéressante, compte tenu de l'enjeu économique et financier de certains projets. Les simulateurs précédemment cités permettent non seulement de simuler tout un procédé mais aussi les différents appareils que peut contenir un procédé. On peut citer : colonne de distillation, d'extraction, d'absorption, les réacteurs chimique, les échangeurs de chaleur etc.

La thermodynamique dans HYSYS

Procédure de calcul

Les procédures de calcul sont souvent représentées sur un diagramme de blocs. Ces diagrammes sont des diagrammes de procédure (procedural flowcharts).

Comment est-il construit ?

Équations d'état

Redlich-Kwong-Soave (SRK) et Peng-Robinson (PR)

- Variante de l'équation de Van der Waals pour les hydrocarbures légers non-polaires
- Les deux modèles sont une amélioration de l'équation d'état de Redlich-Kwong
- Amélioration de la prédiction des équilibres liquide-vapeur (VLE)
- Utilise pour les hydrocarbures non-polaires légers (C1-C4)
- Utilise pour les hydrocarbures lourds (C5 et +)
- Utilise pour le CO₂, CO et H₂S (jusqu'à 25% en mole) dans les hydrocarbures légers
- Utilise pour le N₂ et H₂ dans les hydrocarbures légers
- Jusqu'à 5000 psia
- Température du point critique jusqu'aux températures cryogéniques
- Dans la région critique, PR est le meilleur
- PR : T > -456 °F (271 °C) et P < 15 000 psia (100 000 kPa)
- SRK : T > -225 °F (143 °C) et P < 5 000 psia (35 000 kPa)

Département de génie des procédés

Master 1 en génie chimique

	Soave Redlich Kwong	Peng Robinson
	$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V(V+b)}$ $Z^3 - Z^2 + (A-B-B^2)Z - AB = 0$	$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V(V+b) + b(V-b)}$ $Z^3 + (1-B)Z^2 + (A-2B-3B^2)Z - (AB-B^2-B^3) = 0$
where		
$b =$	$\sum_{i=1}^N x_i b_i$	$\sum_{i=1}^N x_i b_i$
$b_i =$	$0.08664 \frac{RT_{ci}}{P_{ci}}$	$0.077796 \frac{RT_{ci}}{P_{ci}}$
$a =$	$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N x_i x_j (a_i a_j)^{0.5} (1 - k_{ij})$	$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N x_i x_j (a_i a_j)^{0.5} (1 - k_{ij})$
$a_j =$	$a_{ci} \alpha_i$	$a_{ci} \alpha_i$
$a_{ci} =$	$0.42748 \frac{(RT_{ci})^2}{P_{ci}}$	$0.457235 \frac{(RT_{ci})^2}{P_{ci}}$
$\alpha_i^{0.5} =$	$1 + m_i (1 - T_{ri}^{0.5})$	$1 + m_i (1 - T_{ri}^{0.5})$

	Soave Redlich Kwong	Peng Robinson
$m_i =$	$0.48 + 1.574\omega_i - 0.176\omega_i^2$	$0.37464 + 1.54226\omega_i - 0.26992\omega_i^2$ <p>When an acentric factor > 0.49 is present HYSYS uses following corrected form:</p> $0.379642 + (1.48503 - (0.164423 - 1.016666\omega_i)\omega_i)\omega_i$
$A =$	$\frac{aP}{(RT)^2}$	$\frac{aP}{(RT)^2}$
$B =$	$\frac{bP}{RT}$	$\frac{bP}{RT}$

Département de génie des procédés

Master 1 en génie chimique

• Peng-Robinson (PR)

$$\frac{H-H^{ID}}{RT} = Z - 1 - \frac{1}{2^{1.5} bRT} \left[a - T \frac{da}{dT} \right] \ln \frac{V + (2^{0.5} + 1)b}{V + (2^{0.5} - 1)b}$$

$$\frac{S-S_o^{ID}}{R} = \ln(Z-B) - \ln \frac{P}{P_o} - \frac{A}{2^{1.5} bRT} \left[\frac{T da}{a dt} \right] \ln \frac{V + (2^{0.5} + 1)b}{V + (2^{0.5} - 1)b}$$

b_i	$0.077796 \frac{RT_{ci}}{P_{ci}}$
a_i	$a_{ci} \alpha_i$
a_{ci}	$0.457235 \frac{(RT_{ci})^2}{P_{ci}}$
$\sqrt{\alpha_i}$	$1 + m_i(1 - T_{ri}^{0.5})$
m_i	$0.37646 + 1.54226\omega_i - 0.26992\omega_i^2$

$$a = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N x_i x_j (a_i a_j)^{0.5} (1 - k_{ij})$$

$R = \text{Ideal Gas constant}$

$H = \text{Enthalpy}$

$S = \text{Entropy}$

Département de génie des procédés

Master 1 en génie chimique

• Redlich-Kwong-Soave (SRK) et Peng-Robinson (PR)

$$\frac{H - H^{ID}}{RT} = Z - 1 - \frac{1}{bRT} \left[a - T \frac{da}{dT} \right] \ln \left(1 + \frac{b}{V} \right)$$

$$\frac{S - S_0^{ID}}{RT} = \ln(Z - b) - \ln \frac{P}{P^0} + \frac{A}{B} \left[\frac{T da}{a dt} \right] \ln \left(1 + \frac{B}{Z} \right)$$

b_i	$0.08664 \frac{RT_{ci}}{P_{ci}}$
a_i	$a_{ci} \alpha_i$
a_{ci}	$0.42748 \frac{(RT_{ci})^2}{P_{ci}}$
$\sqrt{\alpha_i}$	$1 + m_i (1 - T_{ri}^{0.5})$
m_i	$0.48 + 1.574 \omega_i - 0.176 \omega_i^2$

$$a = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N x_i x_j (a_i a_j)^{0.5} (1 - k_{ij})$$

$R = \text{Ideal Gas constant}$

$H = \text{Enthalpy}$

$S = \text{Entropy}$

Benedict-Webb-Rubin (BWR)

- Corrélation générale utilisant les constantes (8 à 11) des composés purs pour mieux prédire les équilibres de la phase vapeur
- Construit pour la prédiction des propriétés des mélanges d'hydrocarbures (C4 et -) avec N₂, H₂ et H₂S.
- Température inférieure à 200 F
- Pression inférieure à 2000 psia
- Excellent pour prédire les VLE pour le gaz naturel liquéfié (LNG), les gaz naturel synthétique (SNG) et les gaz de pétrole liquéfiés (LPG)
- Utilise pour les séparations cryogéniques H₂ et N₂ du gaz naturel

Kabani-Banner Modification de SRK pour améliorer le calcul des équilibres vapeur-liquide-liquide dans les systèmes eau-hydrocarbure.

Lee Kesler Plöcker Représente bien les mélanges non polaires. Plöcker et al. Appliquent l'équation de Lee Kesler aux mélanges qui est-elle dérivée de l'équation de BWR.

Département de génie des procédés

Master 1 en génie chimique

PRSV Peng-Robinson Stryjek-Vera Permet de traiter les systèmes modérément non-idéaux. On l'utilise pour les systèmes eau-alcool et quelques systèmes alcool-hydrocarbures.

Sour PR Utilise comme base de calcul PR On ajoute le modèle Wilson API-Sour pour mieux évaluer la fugacité de la vapeur. Le modèle de Wilson permet de représenter l'ionisation de H₂S, CO₂ et NH₃ dans la phase aqueuse. On l'utilise les boucles d'hydrotraitement, dans les procédés contenant des eaux acides, dans les colonnes de brutes ou dans les différents procédés faisant intervenir des gaz acides en présence d'eau.

Sour SRK Voir Sour PR

Zudkevitch Joffe Modification de l'équation de Redlich-Kwong (RK). Il permet de mieux prédire l'équilibre liquide-vapeur des systèmes d'hydrocarbures contenant H₂.

- Les mélanges non-idéaux présentent de grands problèmes lors des simulations. Il est alors nécessaire de prédire les coefficients d'activités non-idéaux de la phase liquide et les coefficients de fugacité de la phase vapeur.
- C'est une approche plus empirique que les équations d'états.
- Pour les solutions idéales, les coefficients seront 1. Ce cas n'arrive pas alors il faut obtenir des valeurs pour ces coefficients.
- Les corrélations sont basées sur l'excès d'énergie libre de Gibbs qui représente la non idéalité d'une solution. Le couplage de cette technique avec l'équation de Gibbs-Duhern permet d'obtenir des valeurs de coefficients d'activité.
- Les plus vieux modèles comme Margules et van Laar représentent moins bien l'excès et sont donc plus limité dans leur application.
- Les nouveaux modèles comme Wilson, NRTL (Non random two liquid) et UNIQUAC sont plus solide. Ils demandent par contre plus de ressources informatiques pour obtenir un résultat mais ils donnent de bons résultats dans le cas des mélanges non idéaux tels qu'alcool-hydrocarbures en région diluée.
- Dans HYSYS, les coefficients binaires proviennent de la collection DECHEMA, Chemistry Data Series.
- 16 000 coefficients binaires sont répertoriés. On utilise ces coefficients s'ils sont connus. Sinon ont évalué les coefficients à l'aide d'UNIFAC (Universal functional activity coefficient) pour les inconnus seulement.
- Margules La première équation utilisant l'excès d'énergie libre de Gibbs. Pas de fondement théorique au modèle.
- Van Laar La première équation utilisant l'excès d'énergie libre de Gibbs avec un fondement théorique. Calcul très rapide mais de mauvais résultats avec les hydrocarbures halogénés et les alcools. Attention à l'évaluation des systèmes multi composants. Il a tendance à prédire deux phases liquides même si elles n'existent pas.

Département de génie des procédés

Master 1 en génie chimique

Wilson Proposé par Grant M Wilson en 1964 Le premier modèle d'activité utilisant la composition local pour dérivé l'expression de l'excès d'énergie libre de Gibbs. Une approche thermodynamiquement consistante pour prédire les mélanges multicomposants. Représente les systèmes non-idéaux à l'exception des électrolytes.

NRTL Non random two liquid Proposé par Renon and Prausnitz en 1968 Extension de Wilson Utilise la mécanique statistique et la théorie des cellules liquide pour la structure du liquide. VLE, LLE et VLLE On peut l'utiliser pour les systèmes dilués et pour les systèmes alcool-hydrocarbure.

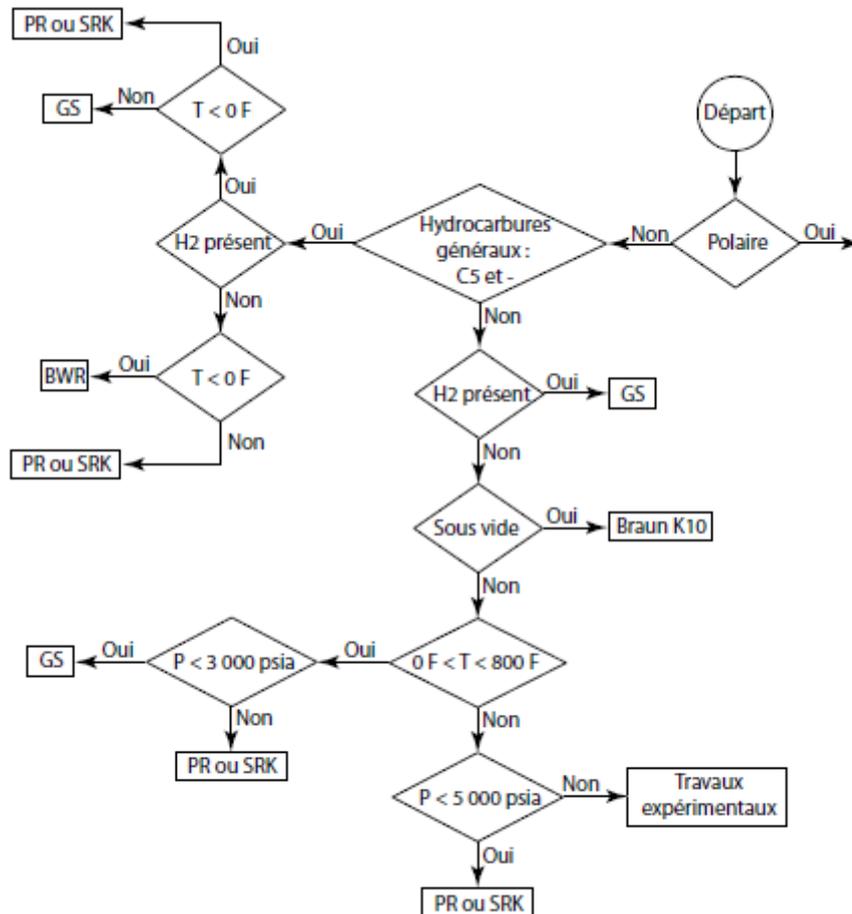
UNIQUAC Universal Quasi Chemical Proposé par Abrams et Prausnitz en 1975 Utilise la mécanique statistique la théorie quasi-chimique de Guggenheim pour représenter la structure du liquide VLE, LLE et VLLE On l'utilise pour les mélanges contenant Eau, alcools, des nitriles, des amines, des esters, des cétones, des aldéhydes, des hydrocarbures halogéné et les hydrocarbures

Henry Loi d'Henry Utilisé lorsque modèle d'activité et non-condensable CH₄, C₂H₆, C₂H₄ (éthylène), C₂H₂ (acétylène), H₂, He, Ar, N₂, O₂, NO, H₂S, CO₂, CO.

L'organigramme de sélection

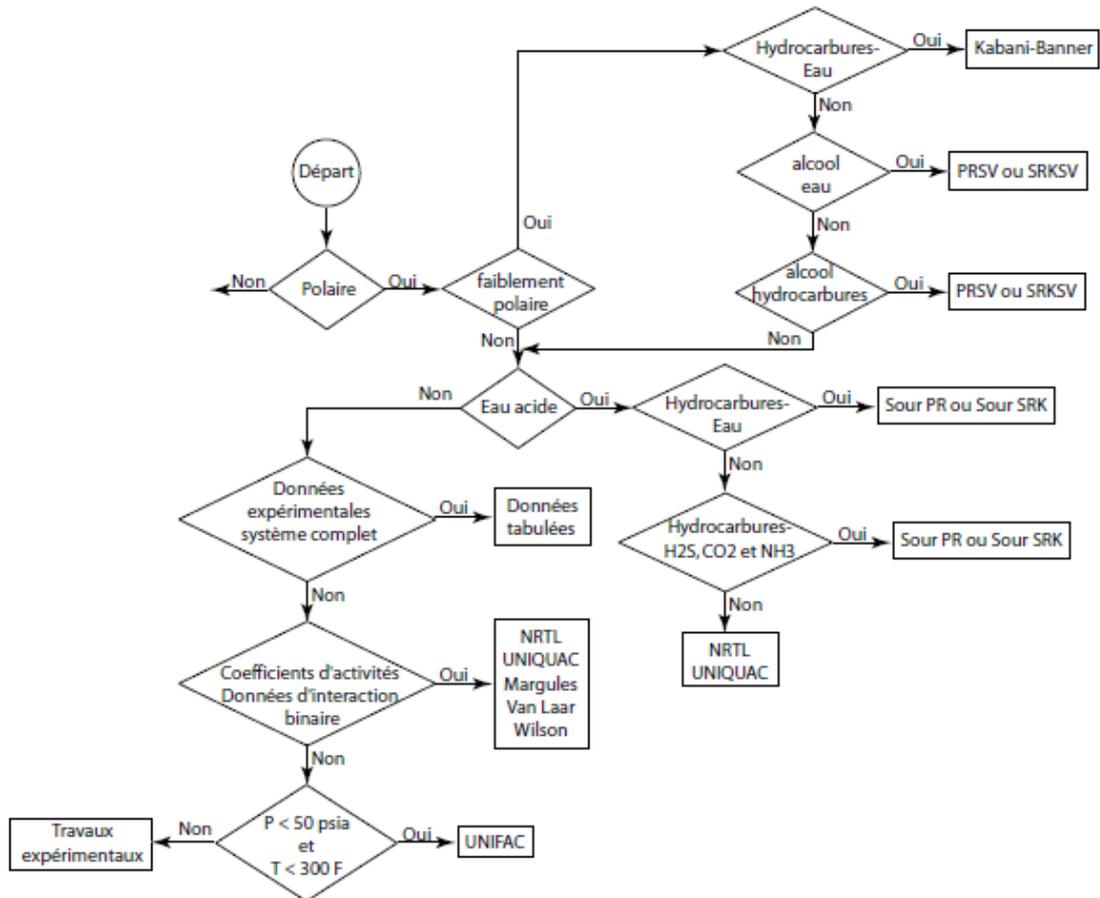
Département de génie des procédés

Master 1 en génie chimique



Département de génie des procédés

Master 1 en génie chimique

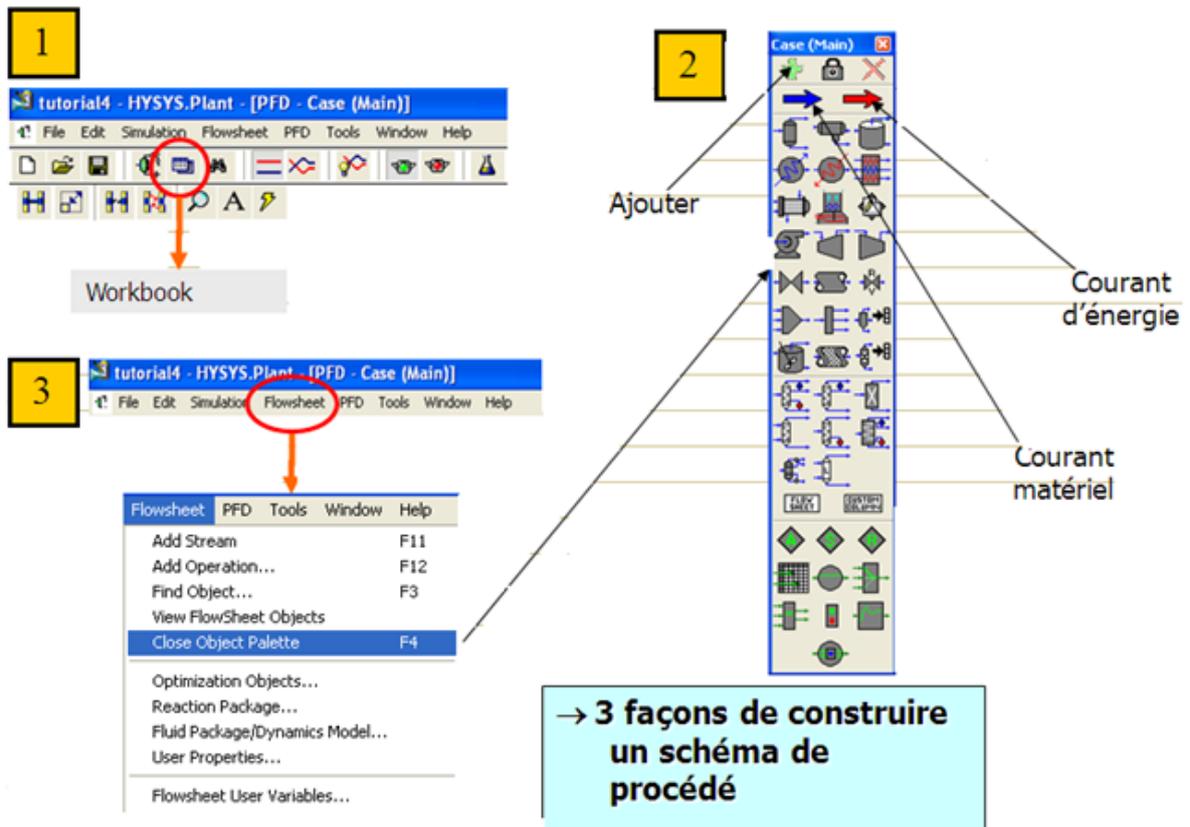


APPLICATION	Margules	van Laar	Wilson	NRTL	UNIQUAC
Système binaire	Oui	Oui	Oui	Oui	Oui
Système multicomposant	Peut-être	Peut-être	Oui	Oui	Oui
Système azéotropique	Oui	Oui	Oui	Oui	Oui
Équilibre liquide-liquide	Oui	Oui	Non	Oui	Oui
Système dilué	Peut-être	Peut-être	Oui	Oui	Oui
Système auto-associatif	Peut-être	Peut-être	Oui	Oui	Oui
Polymères	Non	Non	Non	Non	Oui
Extrapolation	Peut-être	Peut-être	Bon	Bon	Bon

Département de génie des procédés

Master 1 en génie chimique

Construction du PFD



1

2

3

Ajouter

Courant d'énergie

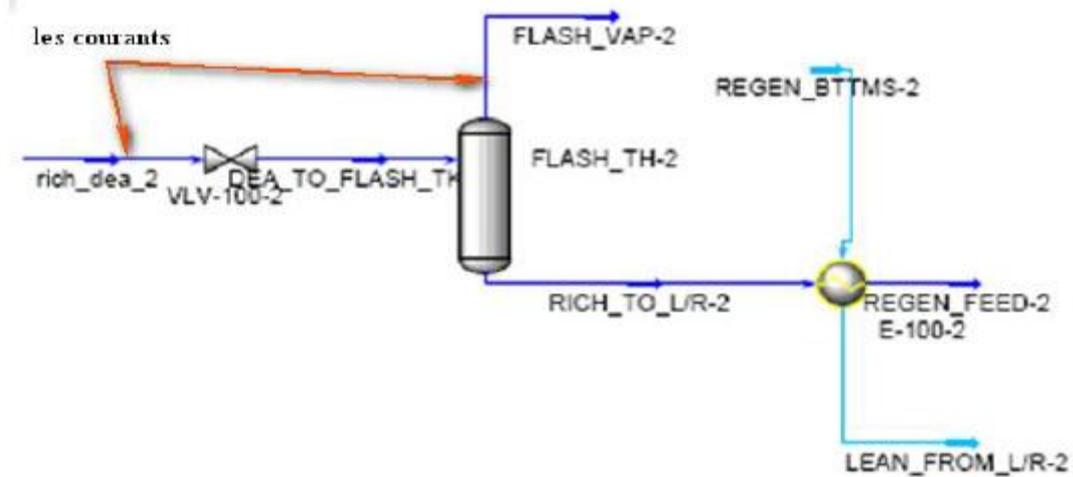
Courant matériel

→ 3 façons de construire un schéma de procédé

Les courants

Département de génie des procédés

Master 1 en génie chimique



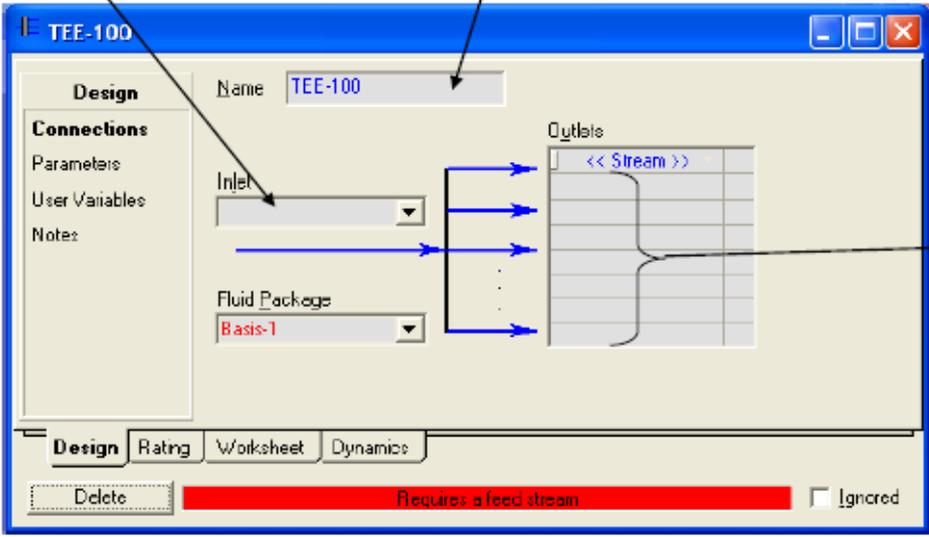
Bilan de matière

Département de génie des procédés

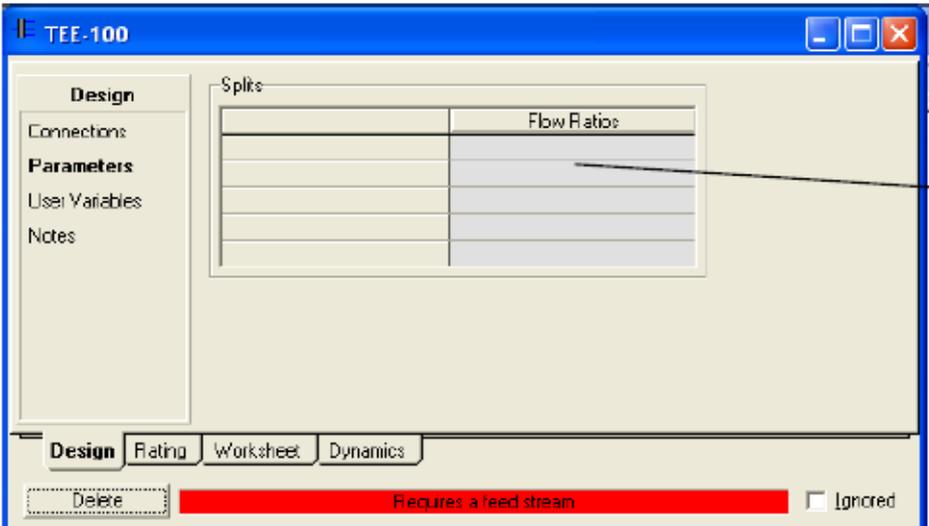
Master 1 en génie chimique

Installation d'un TEE
Une seule Alimentation

Le nom du Tee



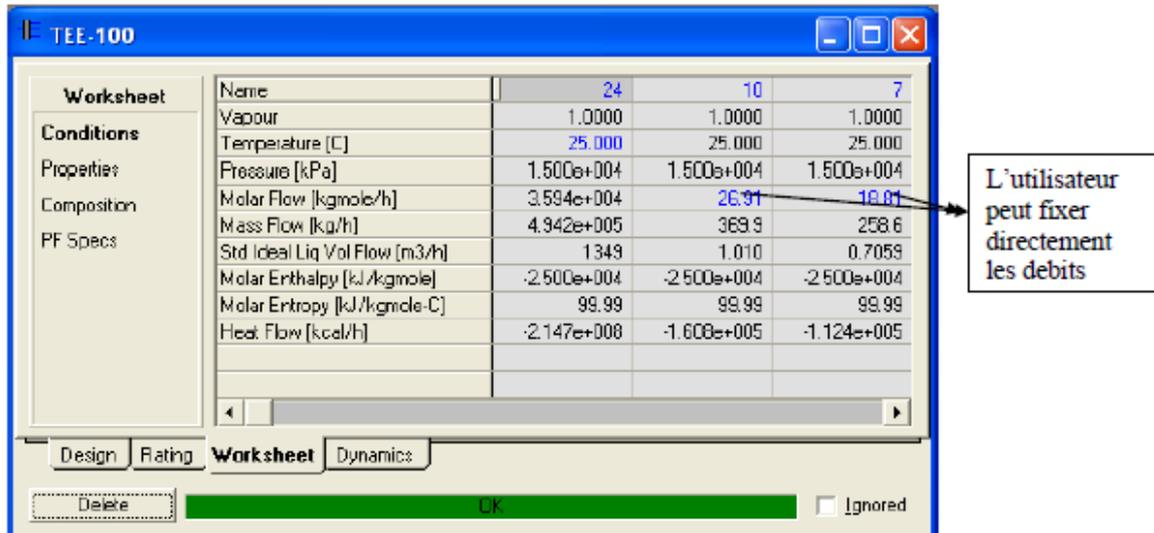
Différents Produits



La répartition des débits de sortie

Département de génie des procédés

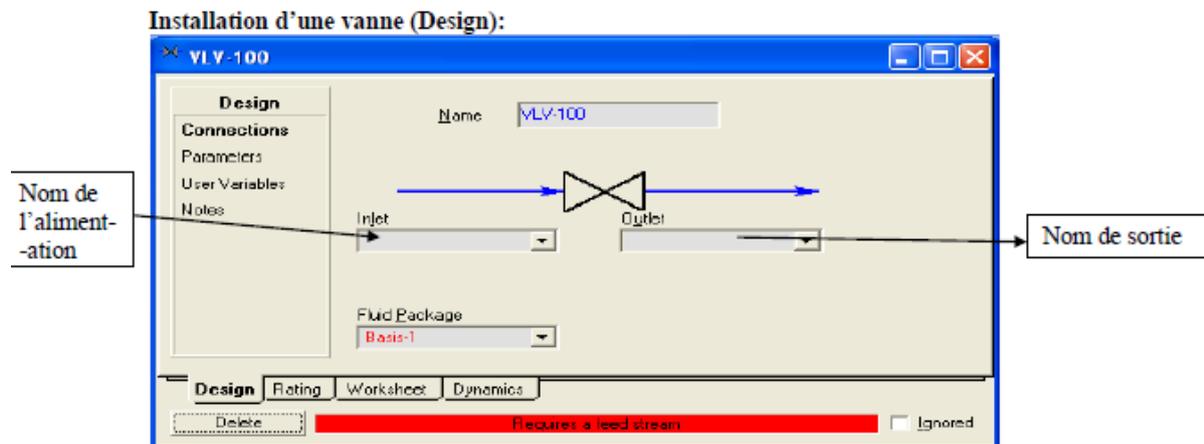
Master 1 en génie chimique



Worksheet	Name	24	10	7
Conditions	Vapour	1.0000	1.0000	1.0000
	Temperature [C]	25.000	25.000	25.000
Proprietés	Pressure [kPa]	1.500e+004	1.500e+004	1.500e+004
Composition	Molar Flow [kgmole/h]	3.594e+004	26.91	16.01
PF Specs	Mass Flow [kg/h]	4.942e+005	369.9	258.6
	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	1349	1.010	0.7059
	Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-2.500e+004	-2.500e+004	-2.500e+004
	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	99.99	99.99	99.99
	Heat Flow [kcal/h]	-2.147e+008	-1.608e+005	-1.124e+005

L'utilisateur peut fixer directement les débits

Les vannes



N.B : Pour le calcul d'une vanne, il est nécessaire de spécifier soit :

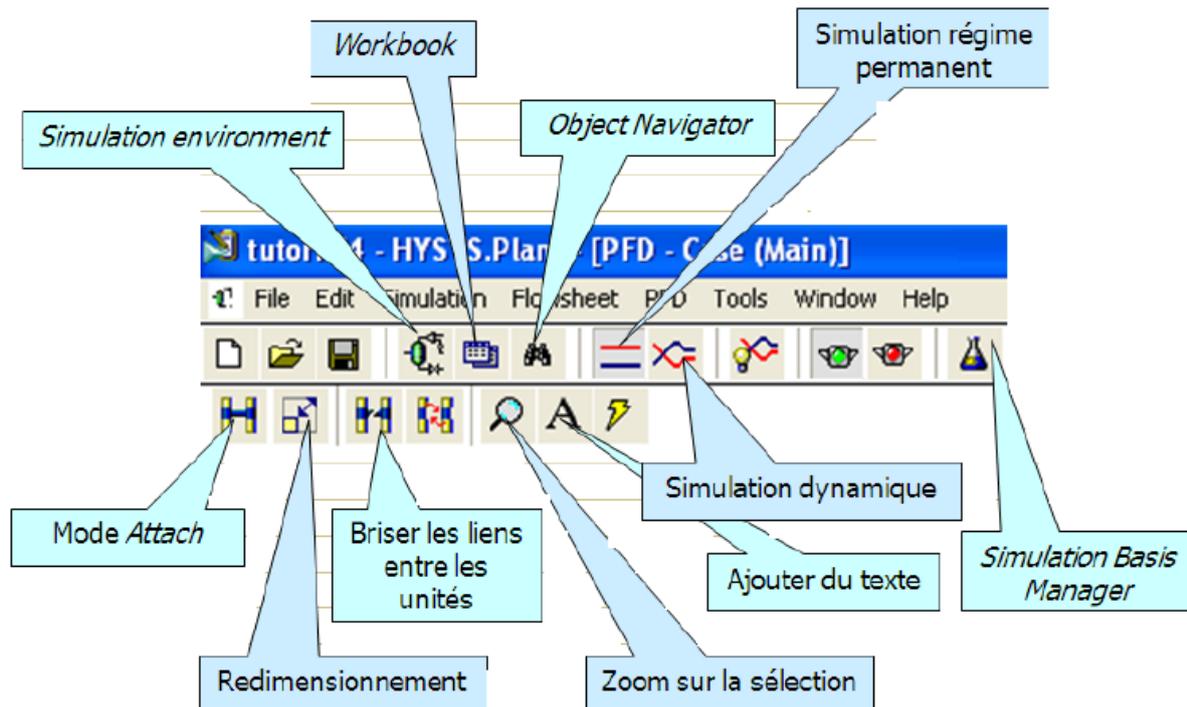
- la perte de charge,
- ou la pression de sortie.
- ou la température de sortie

Département de génie des procédés

Master 1 en génie chimique

Informations générales sur le logiciel :

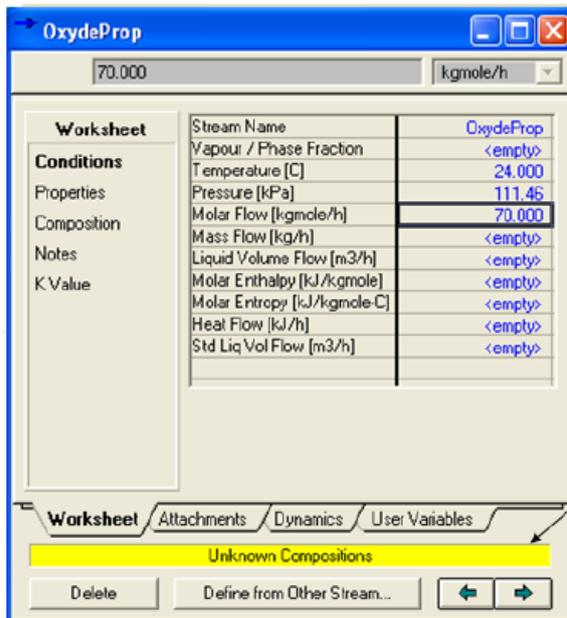
Types d'environnement HYSYS et barres d'outils :



Département de génie des procédés

Master 1 en génie chimique

Courants et unités

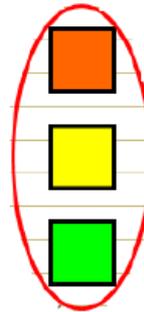


Worksheet		Stream Name	OxydeProp
Conditions	Vapour / Phase Fraction		<empty>
	Temperature [C]		24.000
Properties	Pressure [kPa]		111.46
Composition	Molar Flow [kgmole/h]		70.000
	Mass Flow [kg/h]		<empty>
Notes	Liquid Volume Flow [m3/h]		<empty>
K Value	Molar Enthalpy [kJ/kgmole]		<empty>
	Molar Entropy [kJ/kgmole C]		<empty>
	Heat Flow [kJ/h]		<empty>
	Std Liq Vol Flow [m3/h]		<empty>

Worksheet Attachments Dynamics User Variables

Unknown Compositions

Delete Define from Other Stream...



Évolution du processus de calcul

- Rouge → informations importantes manquantes
- Jaune → informations importantes données mais degré de liberté > 0
- Vert → courant ou unité complètement définis

Distillation in HYSYS:

Introduction:

In this tutorial, you will be walked through a simple distillation process in HYSYS. A binary liquid stream containing 70 mass percent Benzene and the rest Toluene entering at 30°C and 1 atm flowing at a rate of 1 kg-mol/sec will be distilled to ultra pure distillate and bottoms streams.

Initial Setup:

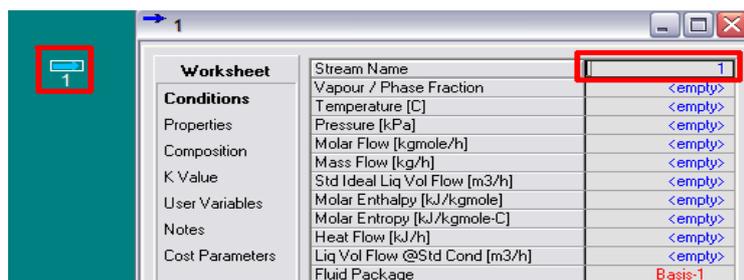
1. Start a new case in HYSYS
2. Select Benzene and Toluene for the components.
3. Use the Peng-Robinson Fluid Package.

Setting up the Distillation Column:

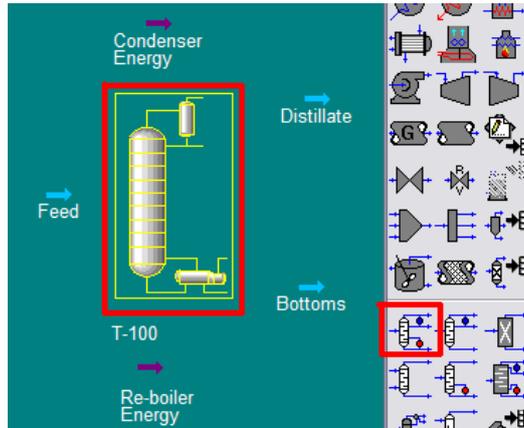
1. Since this is a simple distillation case, 3 process streams are needed. Place 3 material streams for the feed, the distillate, and the bottoms, and 2 energy streams for the re-boiler and condenser.



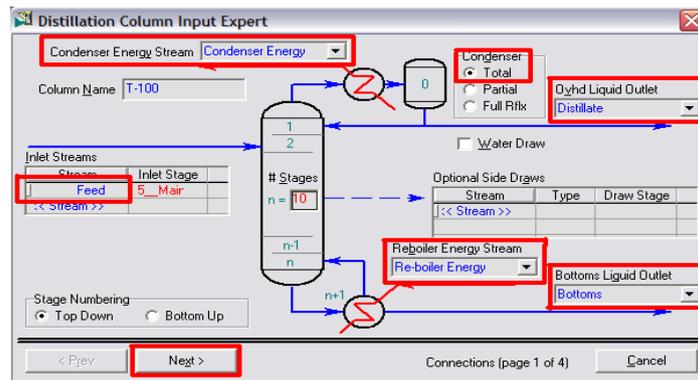
2. In order to make the simulation easy to follow, rename the material streams to feed, distillate, and bottoms. Rename the energy streams to condenser energy, and reboiler energy.



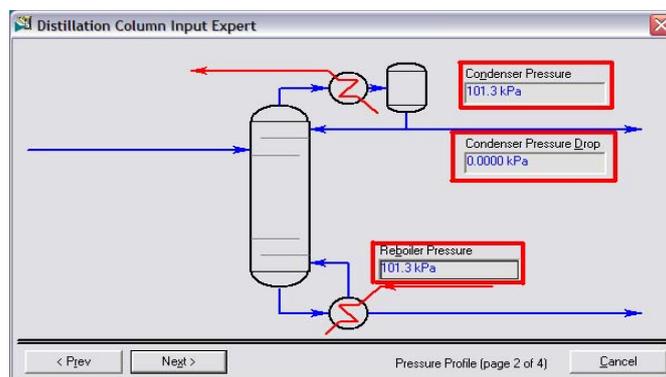
3. Now a distillation column should be placed. Click on the Distillation Column button in the Simulation Toolbar, and then place it on the simulation window.



- Now the column is ready to be hooked up to the process and energy streams. To do this, double click on the Distillation Column to bring up the “Distillation Column Input Wizard”. Hook up the streams to their appropriate locations.
- Now the type of condenser must be specified. HYSYS simulates 3 different types of condensers; a partial, full reflux, and total. Select a total condenser. Click “Next >” to proceed.

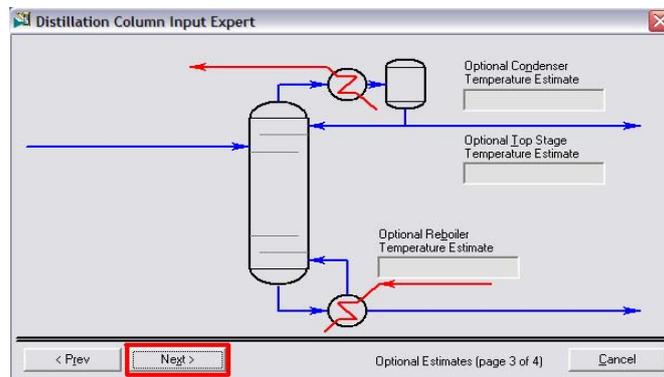


- The next step is to specify the pressures of Distillation column. There are no pressure drops in the condenser and the whole process is run at 101.3 kPa. Type those into the respective fields and click “Next >”.

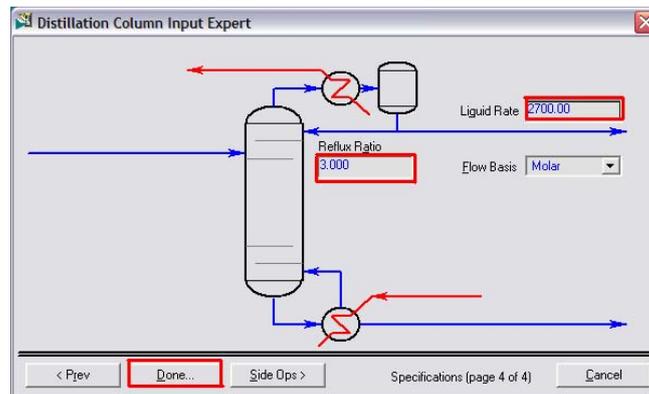


- In the next step, HYSYS prompts for temperature estimates for the top stage, condenser, and re-boiler. Since these are optional fields, they can be ignored and

HYSYS will calculate them when the simulation is run. Click “Next >” to proceed to the final step.



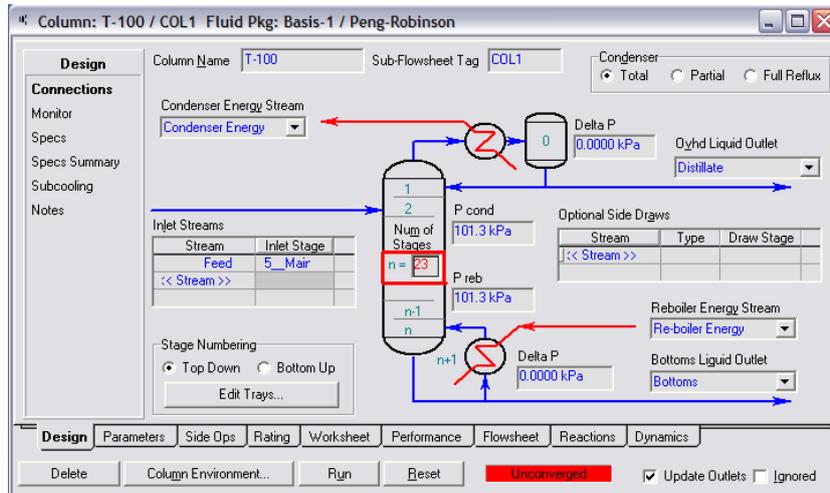
8. The last step to fully configure the column is to specify the reflux ratio and distillate flow rate. A reflux ratio of 3 and a distillate flow rate of 2700 kgmol/hr have been specified. Click “Done...” to complete the distillation column connection and specifications.



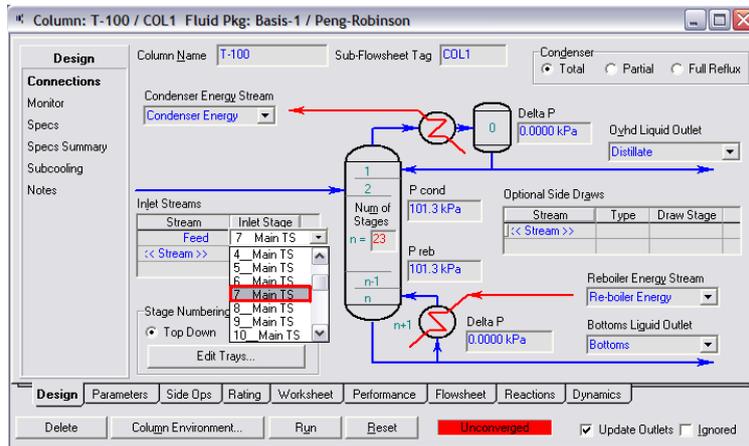
9. Clicking done will bring up a window displaying all of the data and options of the distillation column. In order to achieve the ultra pure distillate stream that is needed, it has been estimated that the column needs 23 trays with the feed entering at tray 7. HYSYS sets the default number of trays at 10 with the feed entering at tray 5, so 13 trays need to be added and the location of the feed needs to be changed.

Note: By default HYSYS numbers the trays in numerically ascending order, with tray 1 being at the top.

10. To add the extra trays, Simply click on “n = ” tab under “Num of Stages” on the drawing of the column, and simply enter in 23.



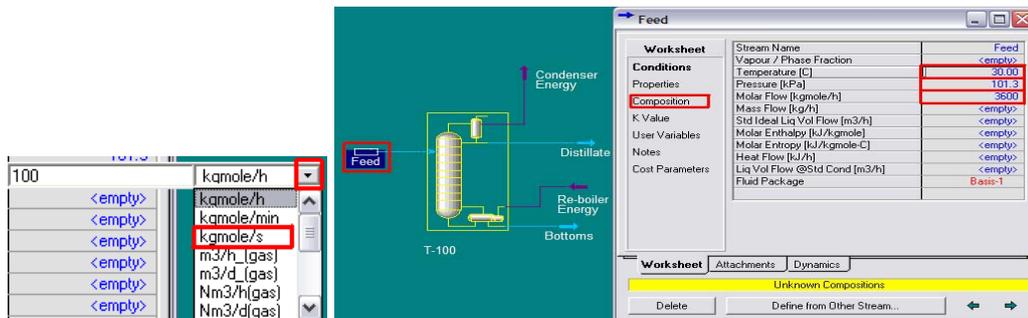
- To change the Tray location from tray 5 to 7, Click the arrow that appears by “5_Main TS” and select “7_Main TS” to change the inlet feed location.



Specifications of the Feed Stream:

After completing the steps above, the Distillation column should be fully specified for most simple distillation cases. To complete and run the simulation, the feed stream needs to be specified.

- Double click on the Feed stream. This will open its specification menu. Select the appropriate tab and simply type in the desired values. For this example, an inlet temperature of 30 C, a pressure of 101.3 kPa, a flow rate of 1 kg-mol/sec, and a feed with 70 mass % benzene have been specified.

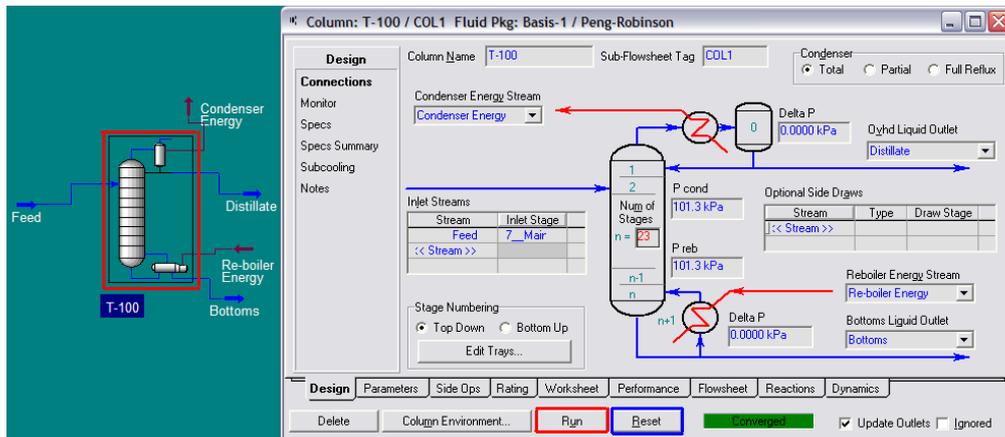


Running the Simulation with a Distillation Column:

Now the distillation column and feed stream are properly specified and the simulation is ready to run.

1. To get HYSYS to start actively running the simulation and solving for unknown properties, the solver must be active. To activate the solver, simply click on the green light  in the upper toolbar.
2. When a distillation column is present in a simulation, it must be started separately. Double click on the column to bring up its main window. Click on the “Run” button to simulate the distillation process. Close the window, and you will see that the distillate and bottoms streams have turned from turquoise to dark blue, signifying that HYSYS has successfully solved for those streams unknown properties, and the simulation is successful.

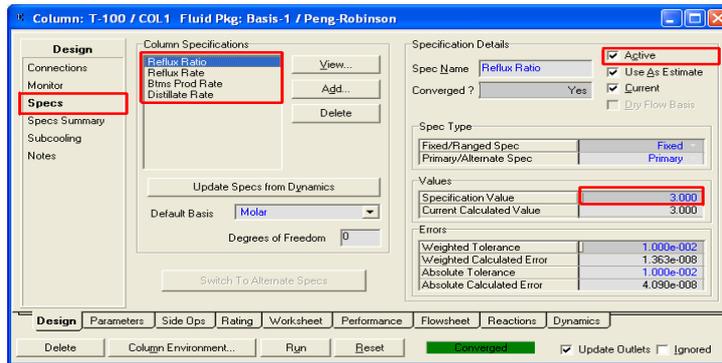
Note: After this stage, if any of the specifications on the distillation column are changed, the “Reset” button must be pressed, and then the “Run” button pressed again to rerun the distillation simulation with the new specifications.



Advanced Specifications of the Distillation Column:

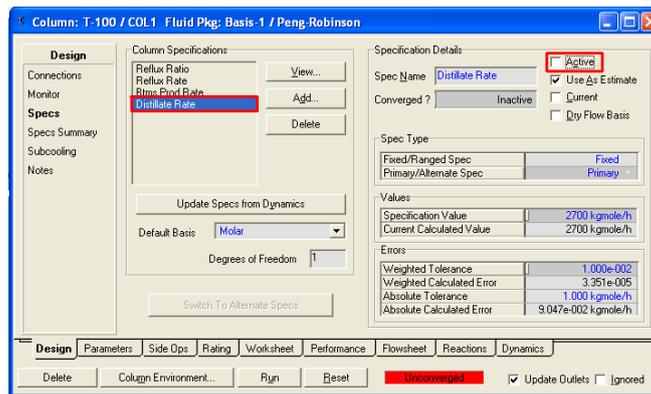
HYSYS has the ability to use different criteria other than the reflux ratio and distillate flow rate to simulate the column. For example, the bottoms flow rate or the composition of the distillate at any given tray can be specified, and HYSYS can simulate the column based on those new specifications.

1. To change the specification criteria of the distillation column, double click on the column, and bring up the main window. Then Click on “Specs” to bring up the advanced specification window.

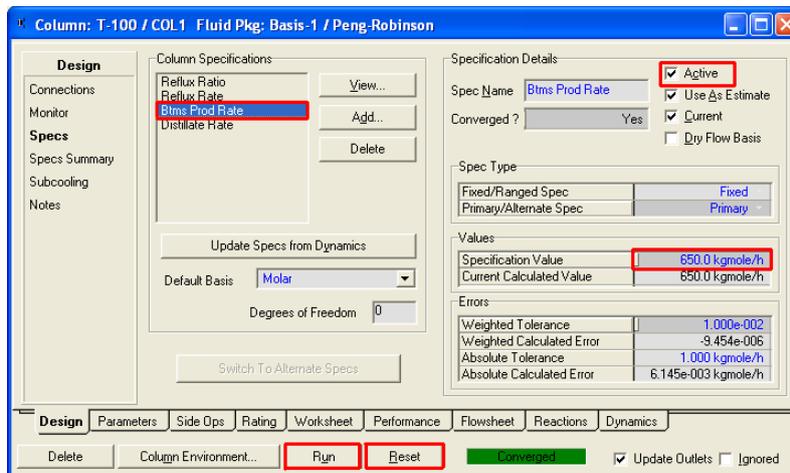


Note: Notice that there are 4 column specifications present; 2 are active and 2 are not. When a specification is active, that means HYSYS is using it to simulate the distillation.

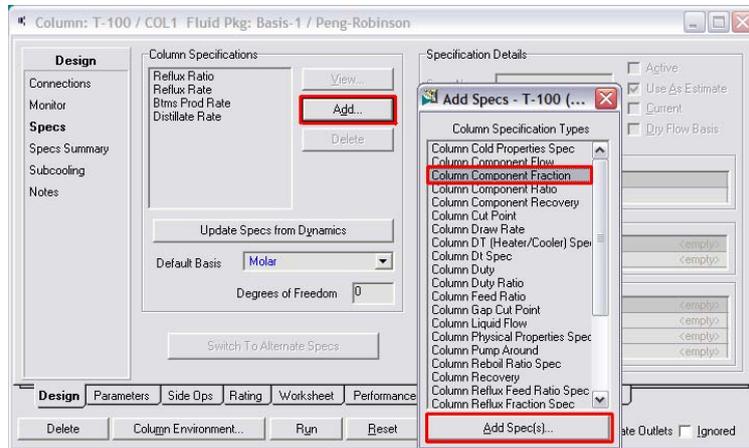
- Say that the specification has changed to a bottoms flow rate of 650 kgmol/hr. To avoid over specifying the distillation column, the Distillate flowrate must be inactive. To do that, select “Distillate Rate” and uncheck “Active” to make it inactive.



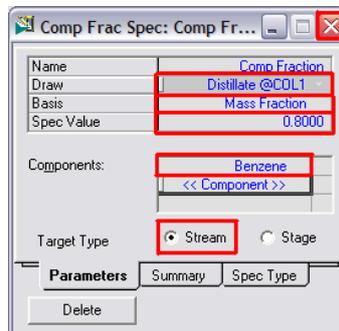
- To make the bottoms flow rate of 650 kgmol/hr specification, select the “Btms Prod Rate” and check “Active” activate it. Type in 650 in the “Specification Value” column. Then click “Reset” and then “Run” to simulate the column using the new specifications.



- HYSYS has the ability to simulate the column based on different specifications not currently seen. For example, a composition of 80 mass % benzene is needed in the distillate. To use that specification, click “Add” in the Column Specifications section and select “Column Component Fraction” from the list. Then Click “Add Spec(s)...”

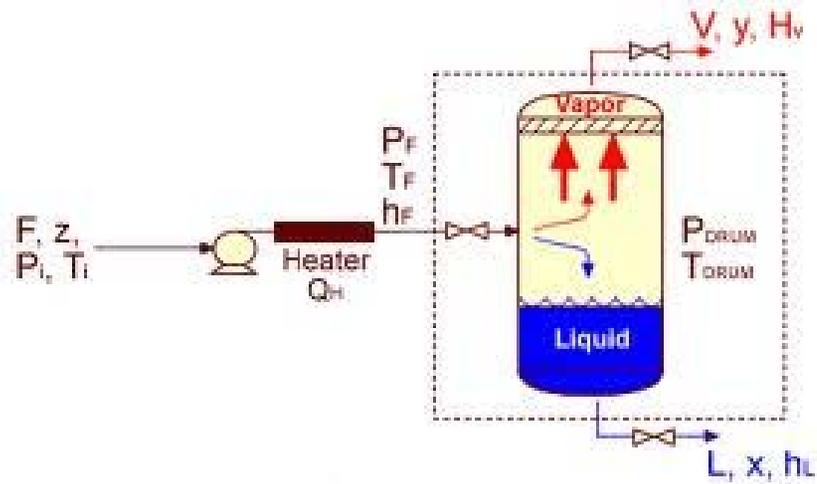


- Clicking Add Specs will automatically bring up a window asking for the composition specifications. Since the composition is specified at the Distillate stream rather than a specific stage, check “Stream”. Then under “Draw” select “Distillate @COL1”. Since the specification was given in Mass percent, select “Mass Fraction” in the “Basis” category. Then enter .8 for the Spec Value. Finally select Benzene as the component for calculation and close the window.



- To avoid conflicts and over specification, the bottoms flow rate specification must be de-activated, and the mass fraction specification activated. Do so by the procedures outlined above. Then click “Reset” and “Run” to simulate the process using the distillate composition as the basis for calculation.

FLASH DRUM DESIGN



Vertical vessel



Horizontal Vessel



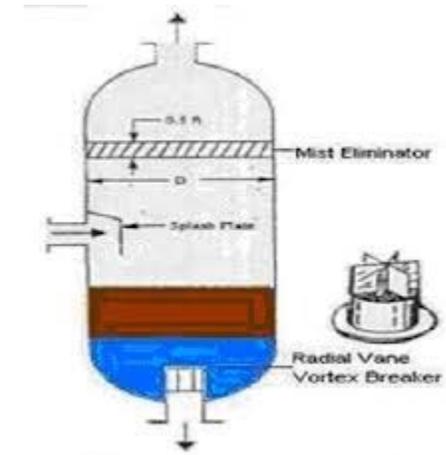
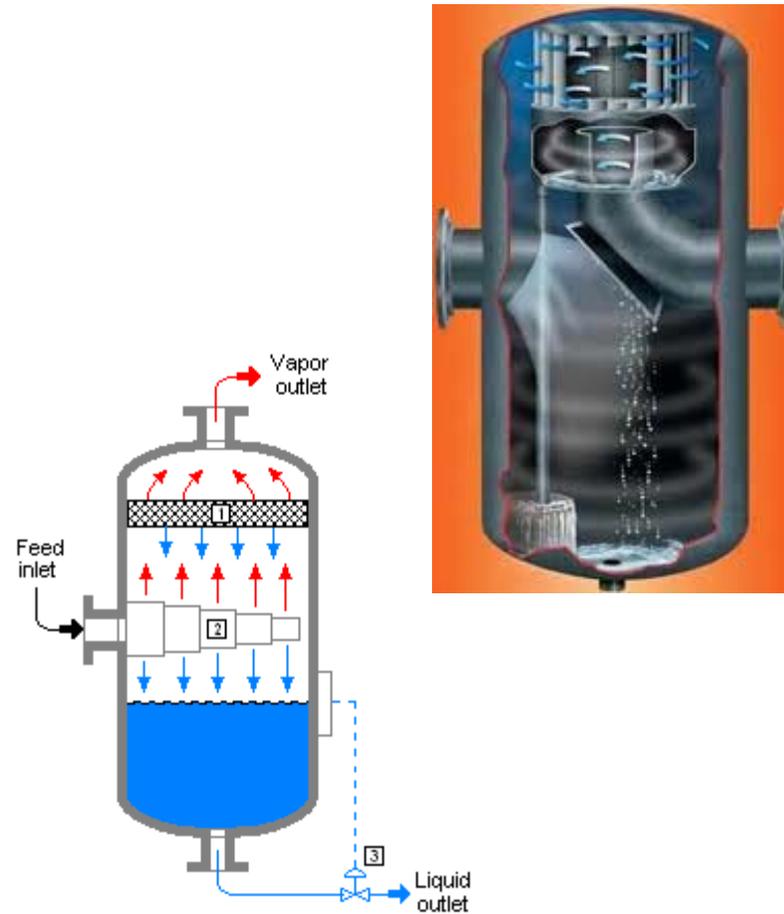
FLASH DRUM DESIGN

Installed Units



FLASH DRUM DESIGN

Deflectors, and Diffusers

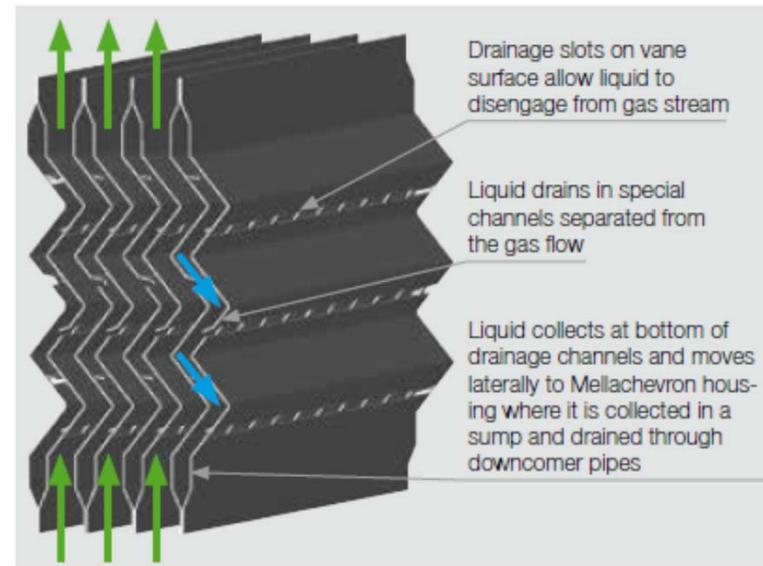
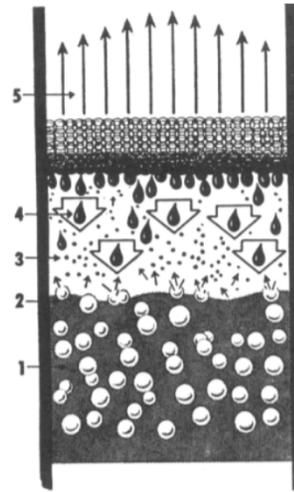


- 1 De-entrainment mesh pad
- 2 Inlet diffuser (distributor)
- 3 Liquid level control valve



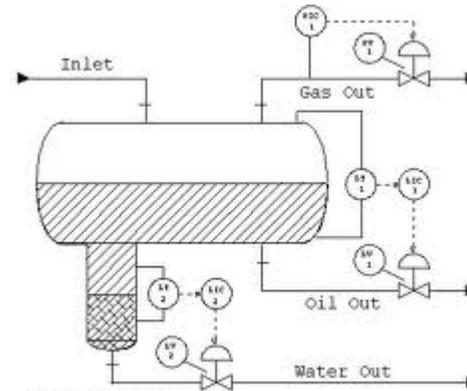
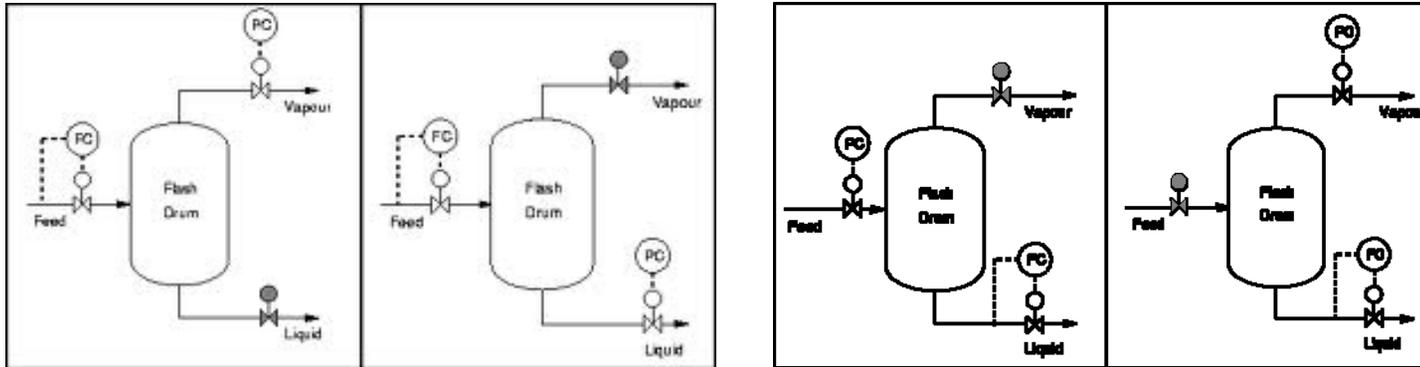
FLASH DRUM DESIGN

Demisters



FLASH DRUM DESIGN

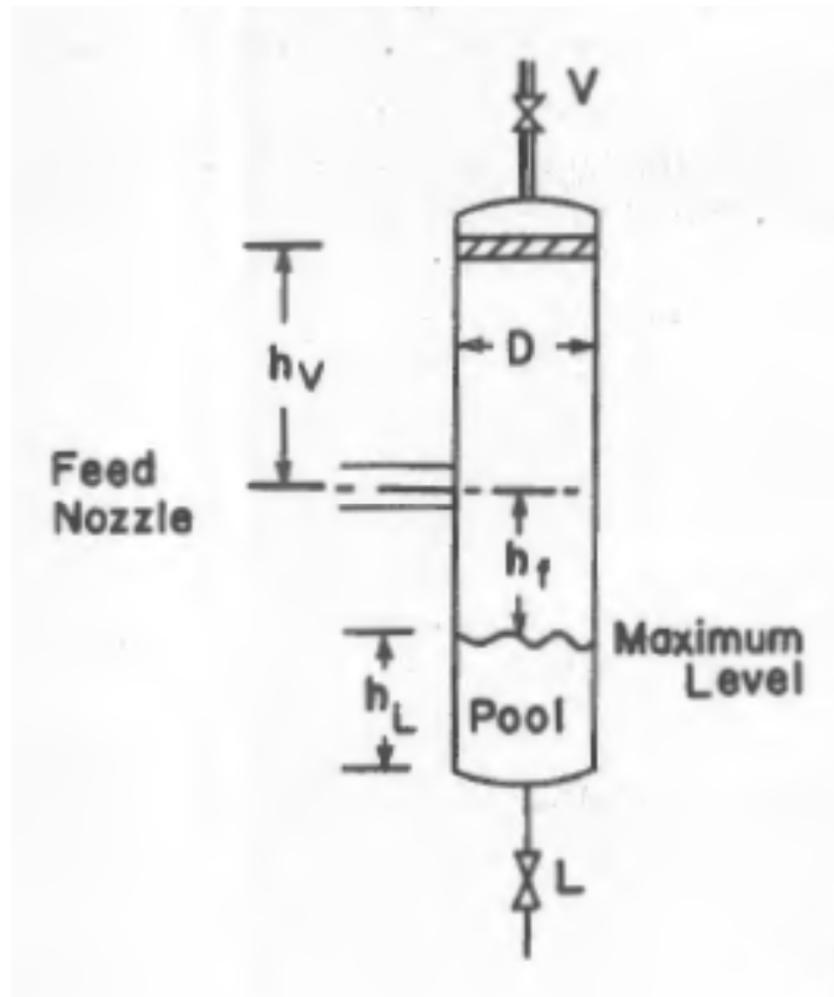
Control Schemes



FLASH DRUM DESIGN

Dimensions to decide

D
 h_v
 h_L
 h_f



FLASH DRUM DESIGN

Calculations to make

$$F = L + V$$

$$Fz_i = Lx_i + Vy_i$$

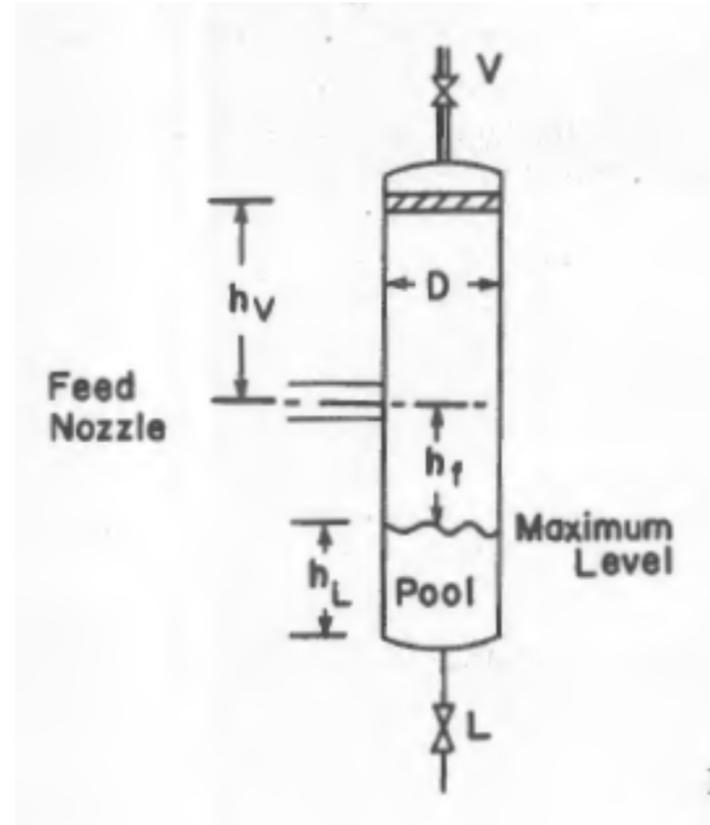
$$y_i = K_i x_i$$

$$\sum_i x_i = 1$$

$$\sum_i y_i = 1$$

$$\Rightarrow \begin{cases} x_i = \frac{z_i}{\left[1 + \frac{V}{F}(K_i - 1)\right]} \\ y_i = \frac{K_i z_i}{\left[1 + \frac{V}{F}(K_i - 1)\right]} \end{cases} \Rightarrow$$

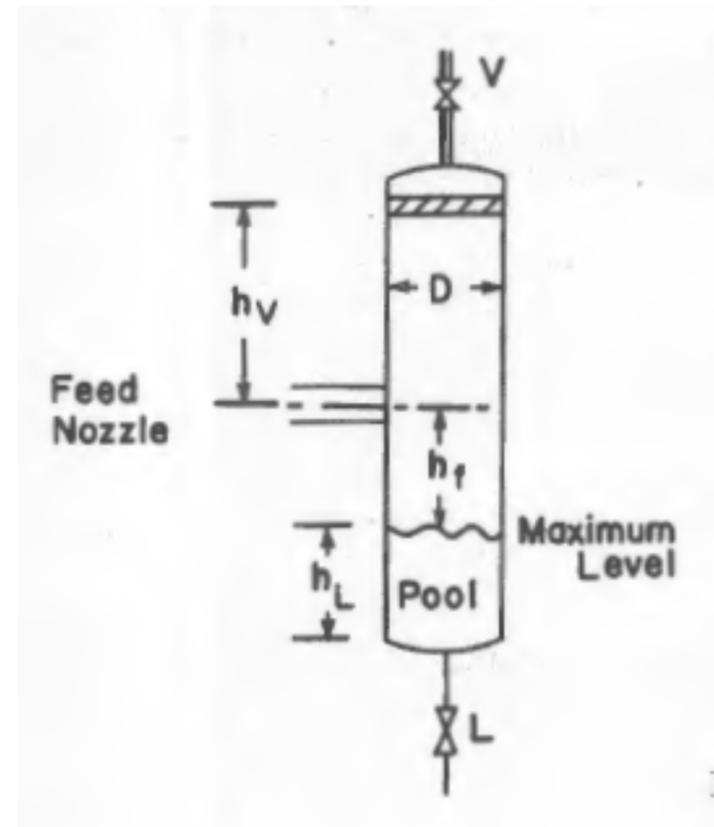
Ratchford Rice Equation (look for it!!)



FLASH DRUM DESIGN

Dimensions to decide

- D related to vapor velocity.
- h_v related to vapor velocity.
- h_L related to level control
- h_f related to flooding

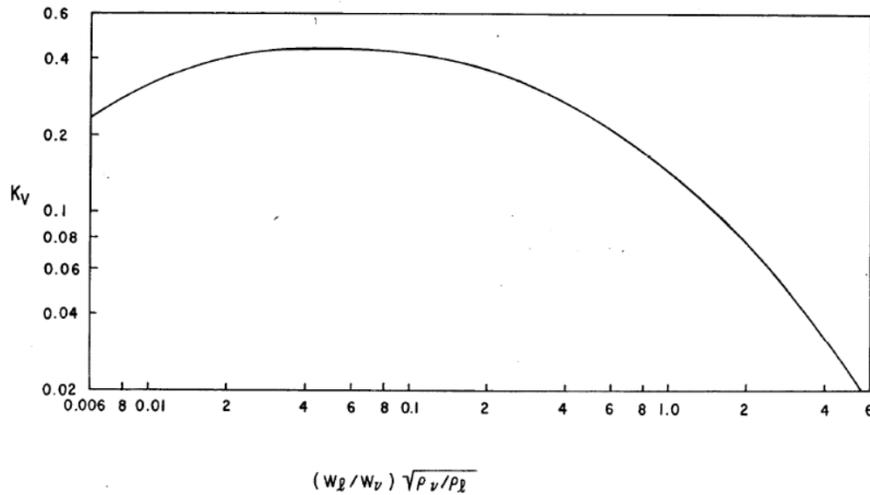


FLASH DRUM DESIGN

D related to vapor velocity.

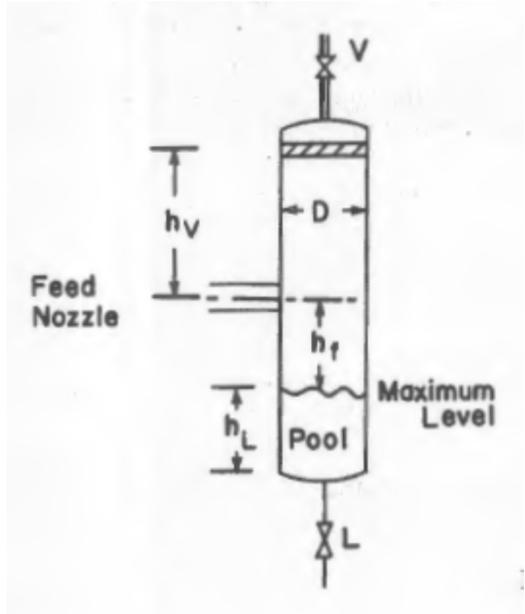
Permitted velocity

$$v_{perm} = K \sqrt{\frac{(\rho_L - \rho_V)}{\rho_V}}$$



$$K = e^{A + B \ln F_{lv} + C (\ln F_{lv})^2 + d (\ln F_{lv})^3 + E (\ln F_{lv})^4}$$

$$F_{lv} = \frac{W_L}{W_V} \sqrt{\frac{\rho_L}{\rho_V}}$$



$$A = -1.877478$$

$$B = -0.814580$$

$$C = -0.187074$$

$$D = -0.014523$$

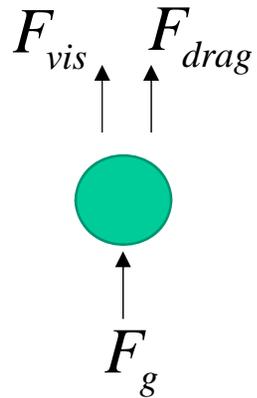
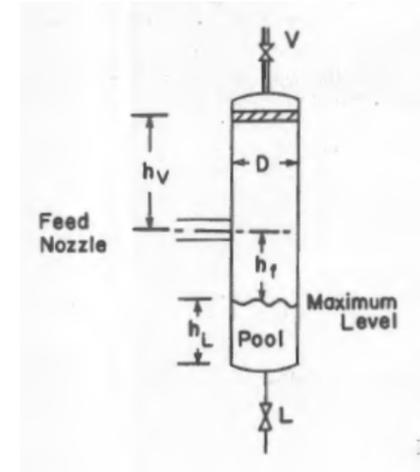
$$E = -0.001015$$

Where do these come from ?



FLASH DRUM DESIGN

D related to vapor velocity.



$$F_{vis} = 6\pi\mu R_d v_d \quad \text{Stokes}$$

$$F_{drag} = C_D \frac{1}{2} A \rho_V v_d^2 \quad \text{drag}$$

$$F_g = (\rho_L - \rho_V) g \frac{4}{3} \pi R_d^3 \quad \text{gravity-Buoyancy}$$

$$F_{drag} + F_{vis} \approx F_{drag} = F_g \Rightarrow C_D \frac{1}{2} (\pi R_D^2) \rho_V v_d^2 = (\rho_L - \rho_V) g \frac{4}{3} \pi R_d^3$$

$$F_{drag} \gg F_{vis}$$

$$\Rightarrow v_{perm} = K \sqrt{\frac{(\rho_L - \rho_V)}{\rho_V}}$$

$$K = \sqrt{\frac{8gR_d}{3C_D}}$$



FLASH DRUM DESIGN

Dimensional analysis for drag: Force is dependent on velocity, cross sectional area, density and viscosity.

$$f_a (F_{drag}, v_d, A, \rho_V, \mu) = 0$$

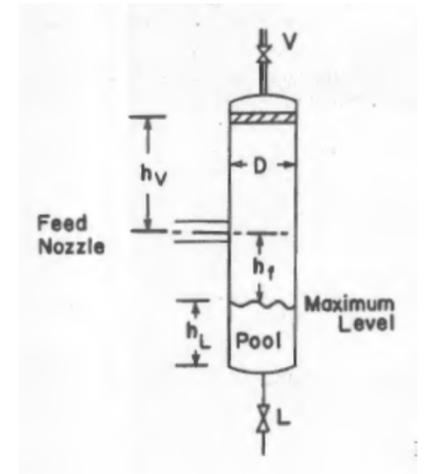
Two nondimensional numbers:

$$Re = \frac{v_d \sqrt{A/\pi}}{\mu} \quad C_D = \frac{F_{drag}}{\frac{1}{2} \rho_V A v_d^2}$$

Therefore

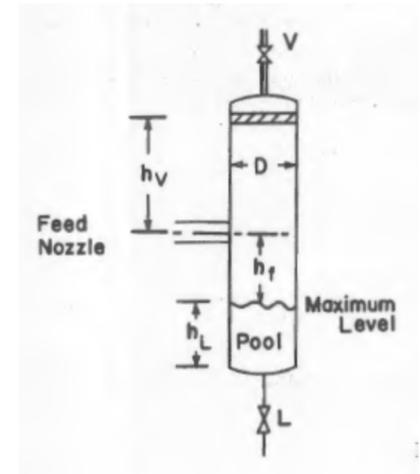
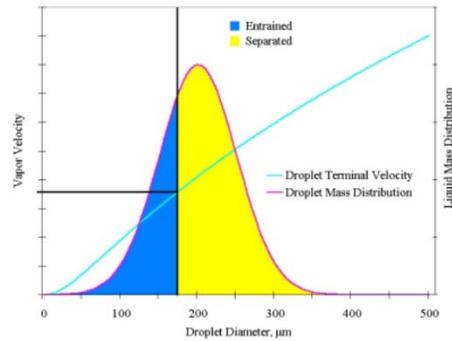
$$f_b (Re, C_D) = 0 \quad \rightarrow \quad C_D = \frac{F_D}{\frac{1}{2} \rho_V A v_d^2} = f_c (Re)$$

Thus C_D is a function of the particle Reynolds number. $\rightarrow K = \sqrt{\frac{8gR_d}{3f_c(Re)}}$



FLASH DRUM DESIGN

But, what R_d should be used? The criteria is that 5% of the liquid is entrained.



Thus

$$K = e^{A+B \ln F_{lv} + C(\ln F_{lv})^2 + d(\ln F_{lv})^3 + E(\ln F_{lv})^4} \quad ; \quad F_{lv} = \frac{W_L}{W_V} \sqrt{\frac{\rho_L}{\rho_V}} \quad \text{were obtained}$$

fitting experimental data.

Therefore

$$D = \sqrt{\frac{4}{\pi} A_D} = \sqrt{\frac{4}{\pi} \frac{V}{v_{perm} \rho_V}}$$

Demisters should take care of 4% (or less) of the 5%.



FLASH DRUM DESIGN

$$h_v = 36" + \frac{1}{2} \text{diameter of feedline}$$

Who came up with this rule and why?

What is so magic about 3 ft? (Room for demister?)

$$h_f = 12" + \frac{1}{2} \text{diameter of feedline}$$

Again, why 2ft? (Residence Time, Failure Analysis, Other Control issues?)

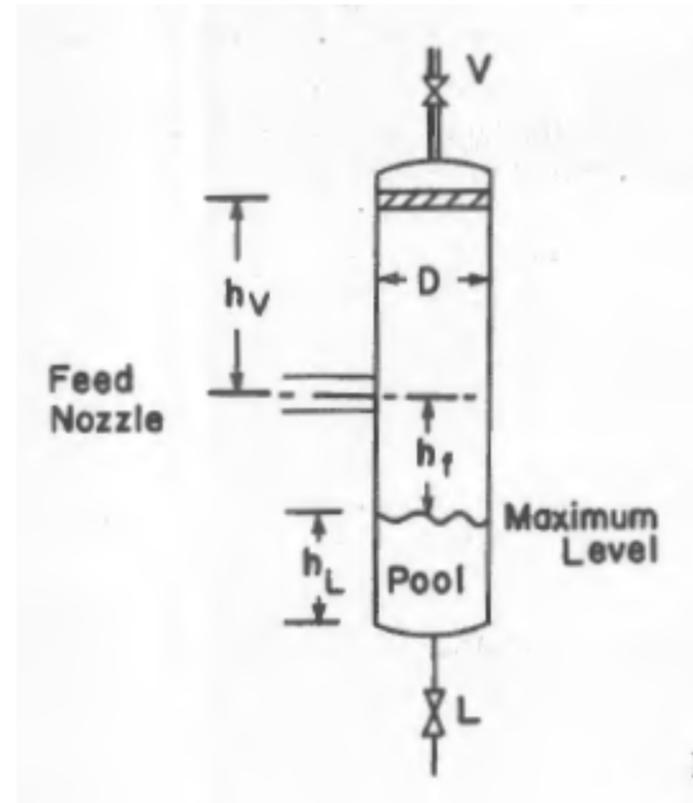
$$h_L = \frac{V_{pool}}{\pi D^2 / 4}$$

or ~2 minutes residence time.

Finally:

$$L = h_v + h_f + h_L$$

Nozzle size $(u_{max})_{nozzle} = 100/\sqrt{\rho_{mix}}$, ft./sec.
 $(u_{min})_{nozzle} = 60\sqrt{\rho_{mix}}$, ft./sec.



FLASH DRUM DESIGN

Final considerations

IF $\frac{L}{D} < 3$ increase V_{pool} (Why???)

IF $\frac{L}{D} > 5$ Use horizontal drum (Why???)

Different design protocol: Why?

