



Université Mohamed Khider de Biskra
Faculté des sciences et de la technologie
Department de chimie industrielle

MÉMOIRE DE MASTER

Domaine : Sciences et Techniques

Filière : Génie des procédés

Spécialité : Génie chimique

Réf. : Entrez la référence du document

Présenté et soutenu par :

Tina Djaber Amine

Le : dimanche 26 juin 2022

Calcul Technologique et simulation du procédé de distillation

Jury :

Mr. Merzougui Abdelkrim	Pr	Université de Biskra	Président
Mr. Hasseine Abdelmalek	Pr	Université de Biskra	Encadreur
Mr. Laiadi Djemoui	MCB	Université de Biskra	Examineur

Résumé

Généralement, l'utilisation de simulateurs dans l'industrie est effectuée sans avoir un support théorique approprié. Parfois, cette situation est la conséquence à la fois du manque de temps et du dynamisme l'application de modèles thermodynamiques n'est souvent pas correctement prise en compte pour le processus spécifique analysé. Un fait indésirable peut apparaître, par exemple, lorsqu'un mauvais package de propriétés est choisi ou encore plus lorsque cette étape de sélection est complètement ignorée. Le but de cet article est de prouver que la sélection habituelle des modèles thermodynamiques est appropriée ou non pour le processus de raffinage primaire. Pour cela, un logiciel de simulation et deux modèles thermodynamiques disponibles ont été analysés. En particulier, pour la distillation atmosphérique du pétrole brut (Topping), les ingénieurs utilisent presque par défaut le package thermodynamique **Peng-Robinson** dans le simulateur **Aspen Hysys** et **Chao-Seader** dans Aspen Plus. Bien que l'utilisation des packages de propriétés thermodynamiques implique tout un support théorique, celui-ci n'est pas pris en compte au moment de leur élection. L'étude présentée dans ce mémoire s'inscrit dans le cadre de l'étude de propriété thermodynamique en utilisant les équations d'états cubiques et leur précisions dans le calcul des propriétés thermodynamiques et en conséquence de faire choisir une meilleure équation pour une meilleure prédiction de ces paramètres .

Mots Clés : distillation, simulation , modèle thermodynamique, ASPEN HYSYS , plateau, reflux.

ملخص

بشكل عام ، يتم استخدام أجهزة المحاكاة في الصناعة دون الحصول على دعم نظري مناسب. في بعض الأحيان يكون هذا الموقف نتيجة لضيق الوقت والديناميكية ، غالبًا ما لا يتم أخذ تطبيق النماذج الديناميكية الحرارية في الاعتبار بشكل صحيح للعملية المحددة التي يتم تحليلها. قد تظهر حقيقة غير مرغوب فيها ، على سبيل المثال ، عند اختيار حزمة خاصة خاطئة أو أكثر من ذلك عند تخطي خطوة التحديد هذه تمامًا. الغرض من هذه المقالة هو إثبات أن الاختيار المعتاد للنماذج الديناميكية الحرارية مناسب أو غير مناسب لعملية التكرير الأولية. لهذا الغرض ، تم تحليل برنامج محاكاة واثنين من النماذج الديناميكية الحرارية المتاحة. على وجه الخصوص ، بالنسبة للتقطير الجوي للنفط الخام (Topping) ، يستخدم المهندسون بشكل افتراضي حزمة Peng-Robinson الديناميكية الحرارية في محاكي Aspen Hysys و Chao-Seader في Aspen Plus. على الرغم من أن استخدام حزم الخصائص الديناميكية الحرارية ينطوي على دعم نظري كامل ، إلا أن هذا لم يؤخذ في الاعتبار في وقت انتخابهم. الدراسة المقدمة في هذه الأطروحة هي جزء من دراسة الخصائص الديناميكية الحرارية باستخدام المعادلات التكميلية للحالات ودقتها في حساب الخصائص الديناميكية الحرارية وبالتالي اختيار معادلة أفضل للتنبؤ أفضل لهذه المعلمات. الكلمات المفتاحية: التقطير ، المحاكاة ، النموذج الديناميكي الحراري ، ASPEN HYSYS ، صينية، الارتداد.

Abstract

Generally, the use of simulators in industry is done without having proper theoretical support. Sometimes this situation is the consequence of both the lack of time and the dynamism. The application of thermodynamic models is often not correctly taken into account for the specific process analyzed. An undesirable fact can appear, for example, when a wrong property package is chosen or even more so when this selection step is completely skipped. The purpose of this study is to prove that the usual selection of thermodynamic models is appropriate or not for the primary refining process. For this, simulation software and two available thermodynamic models were analyzed. In particular, for atmospheric distillation of crude oil (Topping), engineers use almost by default the **Peng-Robinson** thermodynamic package in the **Aspen Hysys** simulator and **Chao-Seader** in Aspen Plus. Although the use of the packages of thermodynamic properties implies a whole theoretical support, this one is not taken into account at the time of their election. The study presented in this thesis is part of the study of thermodynamic property using the cubic equations of states and their precision in the calculation of the thermodynamic properties and consequently to choose a better equation for a better prediction. of these parameters.

Keywords: Distillations, simulation, plate, ASPEN HYSYS , equilibrium, reflux.

Remerciement

En premier lieu et avant tout, je tiens à remercier "Dieu" le tout puissant qui m'a donné le courage, la volonté et la force pour accomplir ce modeste travail et de m'avoir éclairé le chemin de la réussite.

Je remercie vivement mon Encadreur Mr. HASSEINE Abdelmalek pour son aide précieuse et ses conseils judicieux ainsi que les membres de jury qui ont accepté d'examiner mon travail et tous les enseignants du département de Génie des Procédés pour leur contribution et leur disponibilité à orienter les étudiants.

Je tiens à remercier également tous les membres de ma famille pour leur soutien moral et leurs encouragements durant toutes mes années d'études.

Un spécial remerciement pour Mr. LAIADI Djemoui pour ses orientations, ses précieux conseils et sa contribution dans l'élaboration de ce travail.

Finalement, mes remerciements à ceux et celles qui ont contribué de près ou de loin à l'accomplissement de ce travail de recherche.

Dédicaces

A mon exemple éternel, mon soutien moral et source de joie et de bonheur, celui qui s'est toujours sacrifié pour me voir réussir à toi mon père.

A la lumière de mes jours, la source de mes efforts, la flamme de mon cœur, ma vie et mon bonheur ; maman que j'adore.

A mes frères et sœurs qui n'ont cessé d'être pour moi des exemples de persévérance, de courage et de générosité.

Sommaire

Introduction générale

Chapitre I Généralité sur la distillation :	15
I.1 Historique.....	16
I.2 Définition de la distillation.....	16
I.3 Principe de la distillation.....	16
I.4 Les types de distillation.....	17
I.4.1 La distillation discontinue	17
I.4.2 La distillation continue.....	17
I.5 L'équilibre Liquide-Vapeur (ELV)	18
I.6 Lois fondamentales de transfert de matière	19
I.6.1 Loi de Raoult.....	19
I.6.2 Lois de DALTON	19
I.7 Volatilités	20
I.7.1 Volatilité absolue	20
I.7.2 Volatilité relative	20
I.7.3 Utilisation de la volatilité relative:.....	21
I.8 Description d'une colonne de distillation :	21
I.9 Bilan matière et thermique de la colonne	23
I.9.1 Zone de rectification	24
I.9.2 Zone d'épuisement.....	25
I.9.3 Zone de flash	25
I.10 Les différents types de colonnes de distillation	25
I.10.1 Colonnes à garnissage.....	26
I.10.2 Colonnes à plateaux.....	26
I.11 Différents types de plateaux	27
I.11.1 Plateaux à calottes :	27
I.11.2 Plateaux perforés à déversoirs :	27
I.11.3 Les plateaux à clapets:	28
I.11.4 Plateaux uniflux :	28
I.11.5 Plateaux à jets directionnels (jet tray) :	28
I.11.6 Plateaux perforés sans déversoirs :	28
I.12 Les appareillages d'une installation de distillation.....	29
I.12.1 colonne.....	29

I.12.2	Le condenseur	29
I.12.3	Le rebouilleur.....	30
I.12.4	Ballon de reflux.....	30
I.13	Les appareillages annexes.....	30
I.13.1	L'échangeur de chaleurs	30
I.13.2	Les pompes.....	30
I.13.3	Les appareils de mesure, de contrôle et de régulation.....	30
Chapitre II	Distillation des mélanges complexes :	31
Introduction.....		32
II.1	La distillation des mélanges complexes : La méthode (Short-cuts)	33
II.1.1	La méthode Fenske-Underwood-Gilliland (FUG).....	33
II.1.2	Méthode de Fenske : "Fonctionnement à taux de reflux total" :.....	36
II.1.3	Répartition des autres composés (non-clés)[[18].....	37
II.1.4	Reflux minimal par la méthode de Underwood :	38
II.1.5	Taux de reflux optimal	39
II.1.6	Méthode de Gilliland : "Nombre de plateaux théoriques à reflux optimal" :	39
II.1.7	Position du plateau d'alimentaion :	40
II.2	Distillation multicomposants : solution rigoureuse	41
II.2.1	Modélisation mathématique des colonnes multi-étagées de séparation liquide-vapeur ..	42
II.2.2	Formulation des équations du modèle	44
II.2.3	Approches fondamentales de la simulation des colonnes de séparation liquide-vapeur ..	45
II.2.4	Approche mathématique de la résolution du modèle MESH	45
II.2.5	Approche séquentielle	46
II.2.6	Les approches des corrections simultanées.....	47
II.2.7	Principaux algorithmes de l'approche des corrections simultanées	47
Chapitre III	Calcul de la colonne :	48
Introduction :.....		49
III.1	Données de départ	49
III.2	Compositions imposées des courants sortants.....	49
III.3	Calcul de spécification des deux courants distillat (D) et Résidu(R).....	50
III.4	Détermination des paramètres opératoires de la colonne :.....	51
III.4.1	La température au sommet de la colonne	51
III.4.2	La température au fond de la colonne.....	51
III.4.3	Calcul des volatilités relatives α :.....	52
III.4.4	Estimation de la volatilité relative moyenne.....	52
III.5	Détermination du nombre de plateaux théoriques. Méthode de F.U.G.....	53
III.5.1	Détermination de N_{min} :	53

III.6	Répartition des autres composés (non – clés)	53
III.7	Calcul de taux de reflux minimal :	54
III.8	Position du plateau d'alimentation :	56
III.9	Comparaison entre les valeurs de la simulation et le calcul analytique :	56
	Discussion	58
Chapitre IV Simulation de la colonne :		59
	Introduction :	60
IV.1	Définition de simulation	61
IV.2	Principes de fonctionnement et rôle des simulateurs.....	61
IV.3	Type de simulation	62
IV.3.1	La simulation statique (steady state)	62
IV.3.2	La simulation dynamique (transient state)	62
IV.4	Définition du logiciel Aspen HYSYS.....	62
IV.5	Les concepts de la base du simulateur HYSYS.....	63
IV.6	Structure générale du HYSYS	64
IV.7	Le Choix du modèle thermodynamique	64
IV.7.1	Les équations d'état (EoS)	65
IV.7.2	Modèles d'activités	67
IV.7.3	Ensemble de méthodes.....	67
IV.8	Problématique.....	68
IV.9	Méthode de détermination de travaille par HYSYS :	69
IV.10	Résultat de la simulation de la colonne :	76
IV.10.1	Stream 2 : (distillat) :	76
IV.10.2	Stream : 3 (résidu) produit de fond :	78
IV.11	Variation des paramétrés dans la colonne.....	81
IV.12	Interprétation des courb Hysys :	82
IV.13	Résultats et discussion	84
Bibliographie		85
Annexe		85

Listes des figures

Figure I.I :Schéma d'une colonne de distillation (à plateaux).	22
Figure I.II :Colonne à garnissage en vrac (à gauche) structuré (à droite).	26
Figure I.III :Types de plateaux.....	29
Figure II.I :Algorithm for multicomponent distillation by FUG method.....	35
Figure II.II : Schéma général d'une colonne de distillation.	43
Figure II.III : Schéma général d'un plateau d'équilibre.	43
Figure II.IV :Organigramme des approches de résolution du modèle mathématique des colonnes multi-étagées de séparation liquide-vapeur. [25]	46
Figure [†] IV.I : Structure générale du HYSYS [32].	64
Figure IV.II : New Case.	70
Figure IV.III : Choix des composés.	70
Figure IV.IV : Choix de l'équation thermodynamique.....	71
Figure IV.V : Choix du système d'unités.	71
Figure IV.VI : palette d'organigramme.....	72
Figure IV.VII : Le flowsheet.....	72
Figure IV.VIII : Création du flux d'alimentation.	73
Figure IV.IX : Spécification de la colonne.	73
Figure IV.X : Définition du profile de pression.....	74
Figure IV.XI : Estimation de la température.	74
Figure IV.XII : Spécification du distillat et du taux de reflux.....	75
Figure IV.XIII : Espace monitor.....	75
Figure IV.XIV : Introduire d'autres spécifications.	76
Figure IV.XV : Convergence de la colonne.....	76
Figure IV.XVI : Conditions du distillat.....	77
Figure IV.XVII : Propriétés du distillat.	77
Figure IV.XVIII : Conditions de la simulation pour le résidu.	78
Figure IV.XIX : Propriétés du résidu.	78
Figure IV.XX : les compositions de différents courants.....	79
Figure IV.XXI : les compositions de différents courants.....	79
Figure IV.XXII : profile de température en fonction de la position du plateau.	81
Figure IV.XXIII : Profil de débit molaire en fonction du nombre de plateaux.	82
Figure IV.XXIV : la composition molaire des constituants en fonction de la position du plateau.	

Liste des tableaux

Tableau III.I : La composition de la charge.	49
Tableau III.II : composition imposées des courants sortant.	50
Tableau III.III : Résultats de la résolution (en titre molaire et débit molaire)	50
Tableau III.IV : lectures effectuées à partir du Monogramme de Scheibel et Jenny.	51
Tableau III.V : lectures effectuées à partir du Monogramme de Scheibel et Jenny.	52
Tableau III.VI : Volatilités relative.....	53
Tableau III.VII : les compositions de différents courants.	54
Tableau III.VIII : les valeurs du paramètre q	54
Tableau III.IX : résultats des itérations.	55
Tableau III.X: calcul de R_{min}	55
Tableau III.XI : récapitulation des résultats.	56
Tableau III.XII : Tableau comparatif des résultats	56
Tableau III.XIII : Tableau comparatif des résultats 57	57
Tableau III.XIV : Tableau IV-4 : Tableau comparatif des résultats (les valeurs de k).....	57
Tableau III.XV : Tableau comparatif des résultats.....	57
Tableau IV.I : les conditions de différents courants (worksheet).	80
Tableau IV.II : steady state profiles.	80
Tableau IV.III : La composition des constituants sur chaque plateau.	81

Liste des abréviations

ELV- LVE : L'équilibre Liquide-Vapeur

FUG : FENSKE-UNDERWOOD- GILLILAND.

EoS : Les équations d'état

CS : Chao-Seader.

GS : Grayson-Streed .

HC : les hydrocarbures.

PR : Peng-Robinson PR

DDL : degré de liberté

SRK : Equation de SOAVE-REDLICH-KWONG.

RK : Equation de REDLICH-K WONG.

LK : Le constituant clé léger.

HK : Le constituant clé lourd.

PFD : Process Flow Diagram

Nomenclature

X_i: concentration massique du constituant « i » en phase liquide.

X'_i: concentration molaire du constituants « i » en phase liquide.

Y'_i: concentration molaire du constituants « i » en phase vapeur.

Y_i: concentration massique du constituants « i » en phase vapeur.

T: températures (°C).

L': débit molaire de la charge (K moles/h).

D': débit molaire du distillat (K moles/h).

R': débit molaire du résidu (K moles/h).

Q_R: charge thermique du four (kcal/h).

Q_C: charge thermique du condenseur (kcal/h).

H_D: enthalpie de la phase vapeur du distillat à l'état vapeur (Kcal/K moles).

H_R: enthalpie de la phase vapeur provenant du four (Kcal/K moles).

h_D: enthalpie de la phase liquide du distillat à l'état liquide (Kcal/K moles).

h_R: enthalpie du résidu (Kcal/K moles).

H₀: Enthalpie de la phase vapeur de la charge Kcal/Kmol

h₀: Enthalpie de la phase liquide de la charge Kcal/Kmol

α: Volatilité relative de l'élément i.

N: Nombre de plateaux théorique.

N_{min}: Nombre de plateaux minimal.

R: Taux de reflux .

R_{min}: Taux de reflux minimal.

R_{op}: Taux de reflux optimal.

θ: Paramètre conventionnel déterminé a partir d'une autre équation d'underwood.

i: Constante d'équilibre de l'élément « i » .

C_p: Chaleur spécifique (kcal/kg°C).

Introduction Générale

La simulation est devenue de nos jours la méthode de modélisation des procédés industriels, elle est beaucoup utilisée vu les avantages qu'elle offre aux industriels et aux chercheurs académiques dans la faciliter de générer le comportement d'un procédé quelconque, surtout lorsqu'il s'agit de prévoir ou d'étudier des systèmes ou des réactions difficilement réalisables en pratique. L'avantage majeur de la simulation est la fourniture d'un aperçu du comportement du système en se rapprochant d'avantage de la réalité. La simulation informatique peut être classée comme une méthode commode qui ne coûte pas chère et sans intervention sur le procédé réel en cours de fonctionnement, plusieurs simulateurs sous formes de codes et de logiciels sont mis en œuvre et sont disponibles pour la conception des nouvelles unités ou pour l'optimisation des procédés réels.

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.

Le développement de l'informatique dans le domaine de simulation, nous permet de résoudre le problème de calcul manuel long, en utilisant comme outil des logiciels de simulation. Les simulateurs existants tels que Aspen Plus, ChemCAD, Hysim, Hysys, Pro-II sont les plus vendus et qui deviennent de plus en plus indispensables pour concevoir de nouvelles unités et pour optimiser les procédés industriels qui fonctionnent parfois loin de leur optimum.

Les objectifs majeurs des simulateurs de procédés sont les suivants :

Résoudre les équations de bilans matière et énergie pour l'ensemble des appareils du procédé

Calculer les caractéristiques (débit, composition, température, pression, propriétés physiques- Enthalpie, Entropie, viscosité, masse volumique, taux de vaporisation) pour tous les fluides qui circulent entre les appareils

Fournir les éléments nécessaires au dimensionnement des équipements, tels que les quantités de chaleur échangées ; diamètre, hauteur et le nombre de plateaux d'une colonne.

La distillation est une des méthodes de séparation les plus utilisées industriellement. Cette opération permet la séparation et la purification des mélanges de constituants dont les températures d'ébullition sont différentes, en mettant à profit la différence de volatilité (capacité à s'évaporer selon la température) des constituants puis en réalisant une succession de condensations et de vaporisations pour terminer par la récupération d'un des constituants.

Dans l'industrie, la majeure des processus de distillation implique plus de deux composants. Les séparations multi-composantes sont effectuées en utilisant le même type de colonnes de distillation, de rebouilleurs, de condenseurs, d'échangeurs thermiques... etc... Dans le cas de mélanges multi-composants, il est nécessaire d'utiliser une approche analytique. On applique plusieurs méthodes de raccourci sont utilisées pour effectuer des calculs dans des systèmes multi-composantes. Bien que les méthodes informatiques rigoureuses soient disponibles pour résoudre des problèmes de séparation multi-composants,

Il existe plusieurs méthodes pour le calcul de la distillation complexe, les majorités d'elle sont des méthodes numériques basé sur la résolution des équations de bilans matières, bilans enthalpiques et d'équilibres thermodynamiques de tous les étages ; il existe des logicielles comme UniSim ou Aspen permettent de résoudre ces problèmes (résolution exacte mais complexe). Comme il existe la solution approximative par la méthode de FENSKEUNDERWOOD-GILLILAND (FUG).

Un calcul rigoureux des colonnes de distillation doit s'effectuer plateau par plateau, ce qui rend l'opération fastidieuse et longue, surtout lorsqu'il s'agit des colonnes de distillation multiconstituants. Cependant, il existe des méthodes simples et rapides pour le calcul et le dimensionnement des colonnes de distillation traitant les mélanges complexes dites « short-cut méthodes », ces méthodes reposent sur des formules empiriques développées à cet effet, qui ont montré une grande approche et une bonne similitude avec les cas réels.

Le présent travail se veut comme objectif essentiel le traitement d'un problème de distillation de mélanges complexes.

L'étude présentée dans ce mémoire s'inscrit dans le cadre de l'étude de propriété thermodynamique en utilisant les équations d'états cubiques et leur précisions dans le calcul des propriétés thermodynamiques et en conséquence de faire choisir une meilleur équation pour une meilleure prédiction de ces paramètres .

Pour mener à bien cette étude, nous avons structuré notre mémoire comme suit :

Une partie théorique qui regroupe deux chapitres :

Le premier chapitre comporte une description générale de la procédé de distillation et la colonne de distillation.

Le deuxième chapitre : distillation de mélanges complexes, dans lequel on a détaillé les méthodes utilisées pour le calcul des colonnes de distillation, que ce soit par les méthodes rigoureuses utilisant les bilans matière plateau par plateau, ou les méthodes rapides dites « short-cut methods » connues aussi par les méthodes de Fenske-Underwood-Guilliland.

La partie pratique renferme deux chapitres :

Le troisième chapitre : Calcul de la colonne de distillation, Une partie calcul constituée d'un chapitre présentant les paramètres de fonctionnement et le dimensionnement de la colonne.

Le quatrième chapitre sera consacré à la présentation de logiciel Aspen HYSYS et la simulation en général et les résultats de simulation obtenus à laide HYSYS sont présentés. Les résultats obtenus avec chaque modèle thermodynamique PR et CS sont comparés en termes de l'efficacité.

Finalement le travail est terminé par une conclusion générale qui récapitule les résultats les plus importants de cette étude ainsi les recommandations.

Chapitre I :
Généralité sur
la distillation

I.1 Historique

En effet, la distillation est un ancien procédé qui remonte à l'an 2000 avant J.C. On considère que les premières distillations se sont réalisées en Chine, en Egypte et dans la Mésopotamie dans le cadre médicinal et également dans le but de créer du baume, des essences et des parfums. Vers 1810 avant J.C, la parfumerie du roi Zimrilim dans la Mésopotamie a employé cette méthode pour faire tous les mois des centaines de litres de baumes, d'essences et de l'encens de cèdre, de cyprès, de gingembre et de myrrhe. Les distillations effectuées ont pour objectif de produire des cosmétiques, des substances médicinales et des substances utilisées dans l'embaumement des morts et dans la réalisation de rituels spirituels. La reine Cléopâtre connaissait l'art de la distillation et on pense qu'elle a fait un rapport sur ce procédé qui a été perdu. Au Ier siècle, le physicien grec Pedanius Dioscurides a cité ce procédé après avoir observé une condensation dans le couvercle d'un récipient où du mercure avait été chauffé.

Les historiens affirment que l'alambic a été très probablement inventé vers 200 ou 300 après J.C par Marie, la juive ou par Zosime de Panoplie, un alchimiste égyptien dont la sœur, Theosebeia, a inventé beaucoup de modèles d'alambics et de condensateurs de reflux [1] .

I.2 Définition de la distillation

La distillation est une des méthodes de séparation les plus utilisées industriellement. Cette opération permet la séparation et la purification des mélanges de constituants dont les températures d'ébullition sont différentes, en mettant à profit la différence de volatilité (capacité à s'évaporer selon la température) des constituants puis en réalisant une succession de condensations et de vaporisations pour terminer par la récupération d'un des constituants. [2,3,4]

I.3 Principe de la distillation

La distillation consiste à chauffer jusqu'à l'ébullition un mélange liquide, le constituant le plus volatile s'évapore le premier. Par condensation de la phase vapeur, on récupère un liquide nommé distillat ou extrait (dit aussi produit de tête) avec une concentration élevée du composé le plus volatil. La phase liquide non évaporée constitue le résidu ou le raffinat (appelée également produit de pied ou de fond). [5,6]

Comme la thermodynamique la montre, le contact des deux phases conduit à un change des constituants, les plus volatils s'accumulent dans la vapeur et sont éliminés au sommet de la colonne alors que les éléments lourds passent en phase liquide et sont extraits du fond de la colonne,

Cette répartition des constituants entre les deux phases se traduit entre la tête et le fond de la colonne par un gradient de température qui dérive directement du gradient de concentration. L'échange réciproque des constituants d'une phase vers l'autre par diffusion conduit à un équilibre théorique. Un tel système en équilibre constitue un étage théorique, il est caractérisé par des équations entre les concentrations des constituants dans chaque phase traduisant ainsi une sélectivité élémentaire de fractionnement. La distillation ordonne ces contacts en série, sous forme de cascade afin d'amplifier la sélectivité de l'étage théorique. [5,6]

Le principe des différentes techniques de distillation fait appel aux lois qui régissent l'équilibre liquide - vapeur des corps purs et des mélanges.

I.4 Les types de distillation

Selon le procédé de fonctionnement de l'opération de distillation, on distingue : La distillation discontinue et la distillation continue

I.4.1 La distillation discontinue

La distillation discontinue ou « distillation batch » est utilisée pour les produits à forte valeur ajoutée dans l'industrie pharmaceutique, agroalimentaire, régénération de solvant et fonctionne en régime transitoire.

En distillation discontinue, il y a une variation constante au cours du temps des compositions, des débits et des températures dans la colonne. [3,6,7]

En distillation discontinue, le chauffage est appliqué dans un réservoir en fond de colonne (bouilleur), où le mélange est introduit. Les produits les plus légers sont recueillis en premier dans le condenseur qui se trouve en tête de colonne. Lors du passage des différents composés légers, la température en tête de colonne s'accroît.

En fin d'opération, il ne reste plus que le résidu lourd en bas de colonne. C'est pareil que pour la distillation continue, il est très difficile de donner une estimation du coût de ce procédé du fait de la variété des produits traités. [8]

■ La distillation continue

La plupart des colonnes de distillation utilisées dans l'industrie du pétrole et dans les industries chimiques et pétrochimiques fonctionnent en continu.

En distillation continue, le système est en équilibre massique et thermique permanent. Le mélange à traiter est introduit sur le plateau d'alimentation de la colonne. Les composés les plus

volatils se vaporisent à partir du liquide contenu dans la colonne et atteignent le plateau supérieur.

En montant, les vapeurs s'enrichissent en composés volatils. La phase vapeur ainsi enrichie est collectée en haut de la colonne, puis condensée pour fournir un distillat léger.

La phase liquide tombe en cascade vers le bas, s'enrichit en éléments lourds et perd ses éléments légers. Plus le nombre de plateaux ou la hauteur de la colonne est important, meilleure est la séparation. Le but étant de trouver un compromis entre le rendement et le coût de l'opération. Il est très difficile de donner une estimation du coût de ce procédé du fait de la variété des produits traités. Il faut noter qu'avec cette technique il est difficile de séparer des produits dont l'écart de températures d'ébullition est inférieur à 1 degré. En ce qui concerne les rejets générés par ce procédé, la partie non récupérable est généralement incinérée dans un centre de traitement cependant dans le cas où elle est fortement aqueuse, elle est envoyée dans un réseau de traitement biologique.[8,9]

■ L'équilibre Liquide-Vapeur (ELV)

Tout corps pur se vaporise à température constant sous une pression donnée, un mélange passe progressivement de l'état liquide à l'état vapeur par augmentation de température à pression constante et la composition des deux phases supposée en équilibre évolue constamment au cours de la transformation.

L'équilibre liquide-vapeur est un état dans lequel un liquide et sa vapeur (phase gazeuse) sont en équilibre, c'est-à-dire qu'il y a autant de vaporisation (transformation du liquide au gaz) que de liquéfaction (transformation du gaz au liquide) à l'échelle moléculaire. À l'échelle macromoléculaire on n'observe donc aucun changement dans le temps.

A toute température T comprise entre température de bulle et température de rosée sous la pression P , correspond un équilibre liquide-vapeur, caractérisé par les quantités, les compositions et l'égalité des températures des deux phases en présence.

La composition de chaque phase à l'équilibre n'est donc fonction que de la pression et de la température. [3,6,7]

Les différents mélanges de liquide peuvent être classés, d'après le nombre de leurs constituants, en mélanges binaires, ternaires... Les mélanges binaires, qui ont été les plus étudiés, seront seuls considérés ici. On distingue, d'après la solubilité réciproque des constituants :

Les mélanges homogènes comprenant :

Les mélanges normaux parmi lesquels on rencontre les mélanges idéaux.

Les mélanges anormaux ou azéotropiques.

Les mélanges hétérogènes.

■ Lois fondamentales de transfert de matière

■ Loi de Raoult

La loi de Raoult relie la pression partielle d'un composant dans la phase vapeur à la concentration dans la phase liquide, Cette loi permet d'exprimer la proportionnalité, pour une température et une pression données, entre la phase vapeur et les compositions de la phase liquide

$$P_i = P_i^0 \cdot x_i \quad (\text{I. 1})$$

Avec P^0 la tension de vapeur saturante qui est obtenue par l'équation de FRIEDEL :

$$P^0 = \exp\left(a + \frac{b}{T} + C \cdot \ln T + d \cdot T^e\right) \quad (\text{I. 2})$$

Où **a**, **b**, **c**, et **e** sont des constantes

Cette loi est applicable que pour les solutions idéales, c'est à dire les solutions dont les forces intermoléculaires sont identiques ou nulles quelque soit la composition.

a. Point d'ébullition

C'est l'apparition de la première bulle de vapeur lorsqu'on chauffe le liquide (liquide-vapeur).

■ Lois de DALTON

La loi de Dalton s'applique aux gaz et aux vapeurs sans tenir compte du liquide au contact de la vapeur. On peut l'énoncer de la manière suivante :

$$P_T = \sum_i^n P_i \quad (\text{I. 3})$$

P_i : pression partielle du constituant i .

n : nombre de constituants du mélange.

P_T : pression totale du mélange.

La loi de Dalton relie la concentration d'un composé présent dans un mélange idéal de gaz ou de vapeur à sa pression partielle :

$$P_i = P_T \cdot y_i \quad (\text{I.4})$$

b. Point de rosé

C'est l'apparition de la première goutte de liquide lorsqu'on refroidit la vapeur (vapeur-liquide).

I.6.2.1 La loi de HENRY

Dans le cas de mélange réel, la pression partielle d'un constituant A est proportionnelle à sa fraction molaire dans la phase liquide :

$$P_A = E_A \cdot X_A \quad (\text{I.5})$$

Où : E_A : constant d'HENRY

■ Volatilités

La volatilité désigne la plus ou moins grande facilité de vaporisation d'une substance. On distingue la volatilité absolue et la volatilité relative.

I.7.1 Volatilité absolue

Un composé est d'autant plus volatil que sa pression de vapeur saturante est élevée c'est-à-dire que sa température d'ébullition est basse. Pour tout composé A, d'un mélange, l'équilibre liquide-vapeur (ELV) est caractérisé par la volatilité absolue (coefficient de partage entre deux phases) K_A :

$$K_A = \frac{y_A}{x_A} \quad (\text{I.6})$$

La détermination des valeurs des K_A peut se faire soit expérimentalement soit analytiquement en utilisant les modèles thermodynamiques appropriés.

I.7.2 Volatilité relative

Dans un mélange liquide renfermant deux composants i et j, elle est définie comme le rapport entre les volatilités absolues de chaque composant dans le mélange liquide. Elle est exprimée généralement par rapport à la plus grande volatilité, de sorte que sa valeur est supérieure à l'unité.

$$\alpha_{ij} = \frac{K_i}{K_j} \quad (\text{I. 7})$$

La séparation entre i et j est d'autant plus difficile que α_{ij} est voisin de 1.

On trouvera ci-après le diagramme de DePriester permettant la détermination des volatilités d'hydrocarbures légers, sous différentes conditions de pressions et de températures.

I.7.3 Utilisation de la volatilité relative:

Dans les calculs de la rectification des mélanges complexes, on sera amené à effectuer des séries de calcul d'équilibre pour chaque zone. Pour éviter le travail lent et fastidieux des approximations successives, on peut utiliser une méthode simplifiée et rapide donnant une précision assez suffisante. Cette méthode fait intervenir la notion de la volatilité relative α_i étant le rapport des coefficients d'équilibre du constituant i à celui d'un constituant de référence choisit généralement comme étant l'élément le plus lourd (le moins volatile du mélange).

I.8 Description d'une colonne de distillation :

La colonne de distillation est un appareil cylindrique vertical, constitué d'une succession de plateaux ou de garnissages, dont le rôle consiste à mettre en contact une phase vapeur et une phase liquide de manière à effectuer une séparation des constituants présents dans la charge. Cette séparation se fait grâce à un transfert de matière dont la force motrice dépende d'une part des différences de concentration et d'autre part des équilibres liquide-vapeur intervenant entre ces deux phases. [10]

Dans une colonne de distillation (Figure I.I), le liquide se déplace par gravité de haut en bas, et la vapeur de bas en haut, grâce à l'énergie de pression utilisée pour assurer un bon barbotage. Le liquide arrivant au fond de la colonne est partiellement vaporisé dans le rebouilleur qui crée la phase vapeur nécessaire à la distillation, le liquide non évaporé est extrait du fond de la colonne et constitue le résidu. La vapeur arrivant en tête de la colonne est condensée, une partie du produit condensée est envoyée en tête de la colonne en qualité de reflux, le reste est soutiré en tant que distillat (produit de tête). [10]

La colonne est divisée en trois zones :

Zone d'alimentation : c'est l'entrée du mélange à fractionner.

Zone de rectification : se situe au-dessus de la zone d'alimentation.

Zone d'épuisement : se situe au-dessous de la zone d'alimentation

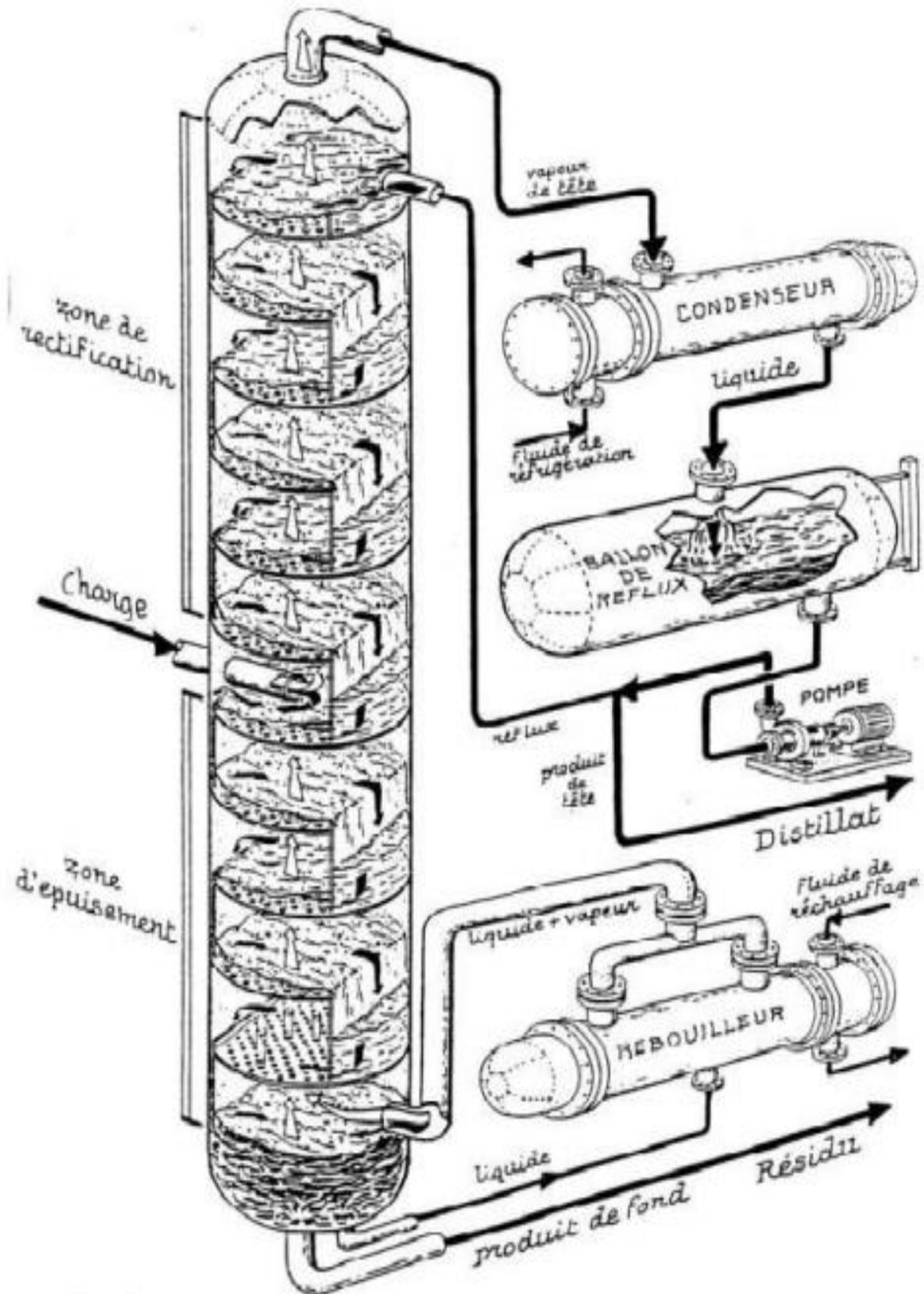


Figure I.1 : Schéma d'une colonne de distillation (à plateaux).

I.9 Bilan matière et thermique de la colonne

On écrit les bilans sur une colonne à distiller fonctionnant en continu comme suite :

Bilan global :

$$L' = D' + R' \quad (I.8)$$

L' : Débit molaire de la charge.

D' : Débit molaire du Distillat.

R' : Débit molaire du Résidu.

Bilan matière partiel :

On va seulement multiplier par la fraction du constituant soit massique soit molaire.

$$L' \cdot X'_{L,i} = D' \cdot Y'_{D,i} + R' \cdot X'_{R,i} \quad (I.9)$$

X'_i : Concentration molaire du constituant «i» en phase liquide.

Y'_i : Concentration molaire du constituant «i» en phase vapeur.

Xi : Concentration massique du constituant «i» en phase liquide.

Yi : Concentration massique du constituant «i» en phase vapeur.

Bilan thermique:

Un bilan thermique consiste en un bilan des gains et des pertes de chaleur dans un système donné. Etablir comme suit :

$$L'h_L + Q_R = D'H_D + R'h_R + Q_C \quad (I.10)$$

$$L'h_L = \left(H_D + \frac{Q_C}{D'} \right) + \left(h_R - \frac{Q_R}{R'} \right) \quad (I.11)$$

$$L'h_L = D'H'_D + R'h'_R \quad (I.12)$$

h_L : Enthalpie de la phase liquide de la charge (Kcal/Kmoles).

H_D : Enthalpie de la phase vapeur du distillat à l'état vapeur (Kcal/Kmoles).

H_R : Enthalpie de la phase vapeur provenant du four (Kcal/Kmoles).

I.9.1 Zone de rectification

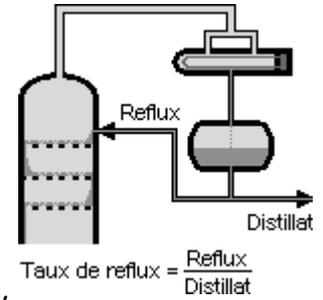
La zone de rectification, a pour objectif d'éliminer les produits lourds du distillat.

Bilan matière global :

$$G'_n = D' + g'_{n-1} \quad (\text{I. 13})$$

Bilan matière partiel :

$$G'_n Y'_n = D' \cdot Y'_{D,i} + g'_{n-1} X'_{n-1} \quad (\text{I. 14})$$



Le taux de reflux R_f est défini comme étant la quantité de reflux g'_x renvoyée à la colonne sur la quantité de distillat D' :

$$R_f = \frac{g'_x}{D'} \quad (\text{I. 15})$$

En admettant que les débits liquides et vapeur sont constants le long de la colonne c'est à dire que :

$$g'_{n-1} = g'_n = g'_x = g' \quad (\text{I. 16})$$

Et :

$$G'_{n-1} = g'_n = G' = D' + g' \quad (\text{I. 17})$$

$$Y'_n = \left(\frac{g'}{G'}\right) X'_{n-1} + \left(\frac{D' + g'}{D'}\right) Y'_D \quad (\text{I. 18})$$

$$Y'_n = R'_f X'_{n-1} + (1 + R'_f) Y'_D \quad (\text{I. 19})$$

Bilan thermique :

$$G'_n H_n = g'_{n-1} h_{n-1} + D' H'_D + Q_C \quad (\text{I. 20})$$

$$G'_n H_n = g'_{n-1} h_{n-1} + D' \left[H'_D + \frac{Q_C}{D'} \right] \quad (\text{I. 21})$$

$$G'_n H_n = g'_{n-1} h_{n-1} + D' H_D \quad (\text{I. 22})$$

I.9.2 Zone d'épuisement

La zone d'épuisement a pour objectif d'appauvrir le résidu en produits légers.

Bilan matière global :

$$G'_{n-1} = G'_n + R' \quad (I.23)$$

Bilan matière partiel :

$$G'_{n-1}X'_{n+1} = G'_nY'_{n,i} + R'X'_{R,i} \quad (I.24)$$

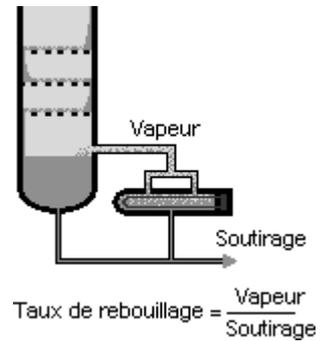
Bilan thermique :

$$g'_{n+1}h_{n+1} = Q_R = G'_nH_n + R' \cdot h_R \quad (I.25)$$

$$g'_{n+1}h_{n+1} = Q_R = G'_nH_n + R' \cdot \left[h_R - \frac{Q_R}{R'} \right] \quad (I.26)$$

$$g'_{n+1}h_{n+1} = Q_R = G'_nH_n + R' \cdot H_R \quad (I.27)$$

$$X'_{n+1} = \frac{G'_n}{g'_{n+1}}Y'_n + \frac{R'}{g'_{n+1}}X'_{R,i} \quad (I.28)$$



I.9.3 Zone de flash

Bilan matière :

$$L' = G'_0 + g'_0 \quad (I.29)$$

Bilan matière partiel :

$$L' \cdot X'_L = G'_0Y'_{0,i} + g'_0X'_{0,i} \quad (I.30)$$

Bilan thermique :

$$L' \cdot h_L = G'_0H_0 + g'_0h_0 \quad (I.31)$$

I.10 Les différents types de colonnes de distillation

La réalisation de contact entre les phases (liquide et vapeur) se fait par deux types de colonne dont les éléments de contact sont différents :

I.10.1 Colonnes à garnissage

Elles sont utilisées dans la distillation et l'absorption. Ces colonnes (Figure I.II) réalisent un contre-courant continu. C'est pourquoi elles sont remplies d'éléments solides (garnissages). On emploie généralement comme garnissage du coke ou de la brique qui ont l'avantage d'être particulièrement bon marché. Techniquement, une colonne à garnissage comporte les équipements suivants :

Des tronçons de garnissage (de 0.3 à 10m de hauteur selon le diamètre de la colonne)

Des grilles support pour les différents tronçons de garnissage

Des collecteurs permettant de récupérer l'ensemble du liquide descendant du tronçon supérieur

Des distributeurs permettant d'assurer une redistribution du liquide sur la surface du garnissage, au niveau de l'alimentation ou du reflux mais également entre deux tronçons.

Le garnissage efficace doit être tel que la surface par unité de volume soit la plus grande possible, bonne distribution du liquide et du gaz et faibles pertes de charges. On distingue deux types de garnissage : garnissage en vrac et garnissage structuré (Figure I.II) [10]

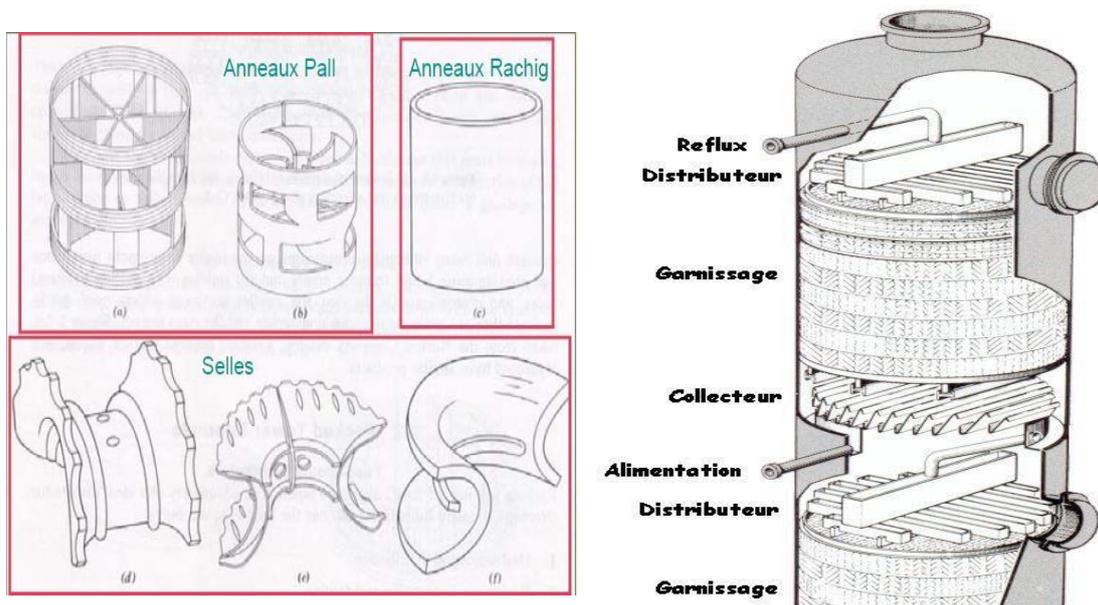


Figure I.II : Colonne à garnissage en vrac (à gauche) structuré (à droite). [10]

I.10.2 Colonnes à plateaux

Les colonnes à plateaux sont utilisées pour réaliser un contact entre une phase gazeuse et une phase liquide de façon à amener celles-ci le plus près possible de l'état d'équilibre. Les transferts de matière et de chaleur entre les phases sont d'autant plus importants que la surface de contact et la turbulence des phases sont plus grandes.

Les colonnes à plateaux ont été mises au point pour la distillation, opération dans laquelle la résistance au transfert de matière est plus importante dans la phase vapeur que dans la phase liquide. Les plateaux sont donc conçus pour assurer une dispersion de la phase vapeur au sein du liquide .

I.11 Différents types de plateaux

Les plateaux d'une colonne ont pour objectif de mettre en contact le liquide, qui redescend par gravité, avec la vapeur qui monte. Ils comportent :

Une aire active percée de trous, éventuellement équipés de clapets ou de cloches d'un barrage permettant de retenir sur le plateau une certaine épaisseur de liquide d'un déversoir permettant d'amener le liquide du plateau considéré vers le plateau inférieur ces deux derniers étant remplacés par des tubes déversoirs pour des petites colonnes. On distingue plusieurs types de plateaux :

I.11.1 Plateaux à calottes :

C'est le modèle le plus ancien il se rencontre encore dans les industries pétrolières ou chimiques. [11][12] Il est constitué d'une plaque perforée, chaque trou étant muni d'une cheminée, celle-ci sert à guider une calotte dont la fixation est assurée par une tige et un contre-écrou. [13] Une centaine de formes différentes de calottes ont été imaginées et conduisent à des efficacités de contact plus ou moins bonnes. [13] Les calottes peuvent être disposées en carré ou en triangle. [11]

Une certaine quantité de liquide est maintenue sur le plateau grâce à un déversoir qui assure l'écoulement du liquide vers le plateau inférieur. La qualité prédominante d'un plateau à calottes est sa faculté d'adaptation à une très large gamme de débits liquide et vapeur. Son utilisation est toutefois restreinte en raison de son coût élevé et des fortes pertes de charge qu'il crée dans la colonne. [12]

I.11.2 Plateaux perforés à déversoirs :

Les plateaux perforés ont un prix de revient faible et une simplicité de construction et de fonctionnement [13], ils n'ont pas obtenu beaucoup de succès, car les performances ne demeurant acceptables que pour des variations de débit très faible autour de la valeur optimale pour laquelle ils ont été calculés .la valeur traverse verticalement la couche de liquide. [10]

I.11.3 Les plateaux à clapets:

C'est un plateau dont les orifices sont équipés de clapets. [11] La hauteur de soulèvement de ces derniers est fonction du débit de vapeur. Les vapeurs s'échappent horizontalement dans le liquide. [14]

Les plateaux à clapets se sont progressivement substitués aux plateaux à calottes car leurs performances sont légèrement supérieures pour un prix de revient plus faible. [11][12]

Il existe une grande variété de forme de clapets : ronds, triangulaires allongés. Certains modèles offrent la possibilité de tarer le clapet en fonction du débit de vapeur. [12]

I.11.4 Plateaux uniflux :

C'est une variante du plateau à calottes. Le plateau est décomposé en bandes ayant une section en S et l'échappement de la vapeur aux échancrures s'effectue vers le déversoir aval, ce qui favorise l'écoulement du liquide sur le plateau. [10]

Par contre la dispersion de la vapeur dans le liquide est moins homogène c.à.d. que le contact liquide-vapeur est moins bon que pour les types de plateaux considérés précédemment. [10]

I.11.5 Plateaux à jets directionnels (jet tray) :

Dans le plateau sont découpées des languettes leur inclinaison est dans le sens de l'écoulement du liquide sur le plateau, l'échappement orienté de la vapeur sous les languettes facilite l'écoulement du liquide, et permet de diminuer le gradient liquide sur le plateau. La perte de charge est moins importante et le prix de revient faible, la construction est très simple. [5, 6]

Mais il faut avoir une pression bien déterminée pour empêcher le passage de liquide par les languettes.

Ces derniers sont mobiles et articulés au plateau par une charnière, ce qui apparent au modèle à soupapes.

I.11.6 Plateaux perforés sans déversoirs :

Ils sont du type perforé, donc de construction peut onéreuse. Liquide et vapeur circulent à contre courant par les mêmes orifices, de sorte que l'ensemble peut être traité comme une colonne à garnissage. Le niveau liquide sur le plateau correspond à la balance dynamique des écoulements liquide et vapeur à travers les orifices. Ces plateaux ont une bonne efficacité et un prix de revient peut élevé, ils présentent les mêmes inconvénients que les plateaux perforés. [10]

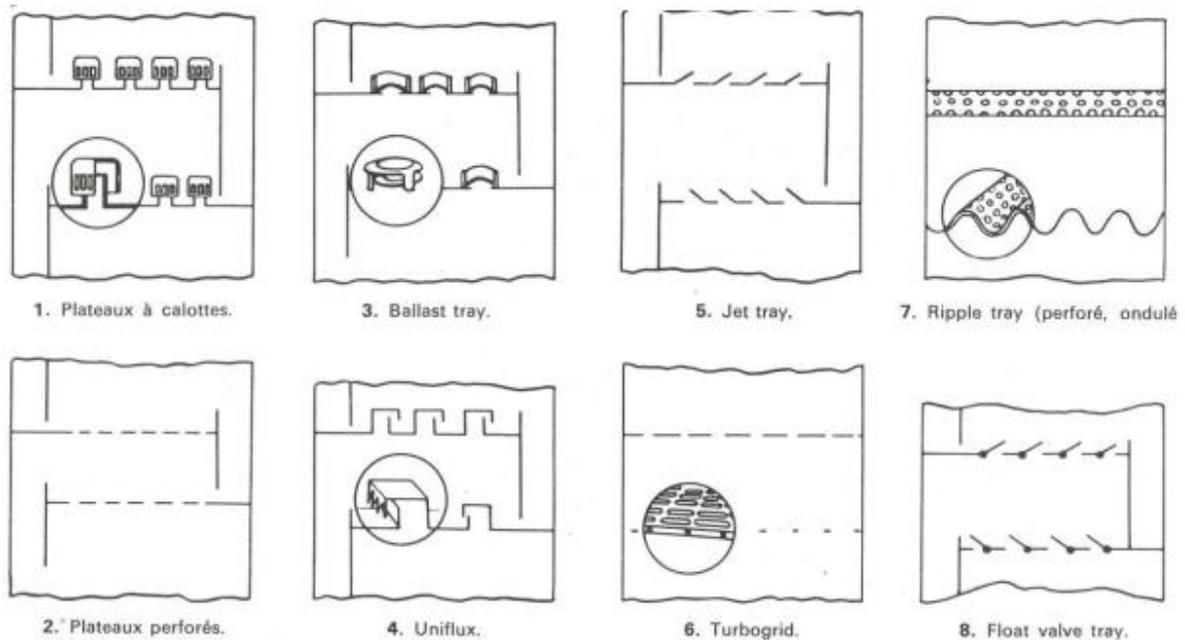


Figure 1.III :Types de plateaux.

I.12 Les appareillages d'une installation de distillation

I.12.1 colonne

La colonne de fractionnement est la partie essentielle dans une unité de distillation. Dans sa très grande majorité c'est une tour cylindrique verticale de hauteur et de diamètre variable, formé d'une virole et de deux fonds. L'intérieur est divisé en compartiments horizontaux appelés plateaux. Généralement la colonne peut atteindre près de 50m de hauteur et 6m de diamètre .Elle est montée verticalement et repose sur des pieds ou une jupe.

I.12.2 Le condenseur

C'est également un échangeur de chaleur dans lequel la vapeur sortant en tête de colonne peut être refroidie pour être enfin condensée.

Les condensations les plus souvent rencontrées sont :

I.12.2.1 Condensation totale

Toutes les vapeurs sont condensées en un liquide se séparant ensuite entre reflux et distillat, Condenseur total n'est plus un étage de séparation. Par rapport à une colonne conçue sur la base d'un condenseur partiel, il faut donc rajouter un étage interne à la colonne si le condenseur est doit être total.

En fait, la construction de McCabe et Thiele est exactement la même, que le condenseur soit total ou partiel, mais elle commence au deuxième plateau (au lieu du premier) dans le cas d'un condenseur total.

I.12.2.2 Condenseur partiel :

Un condenseur partiel est un étage d'équilibre qui effectue une séparation (le distillat et le reflux n'ont pas la même composition). On demande donc au condenseur de liquéfier distillat et reflux, on parle donc de condenseur total. Un condenseur total n'est plus un étage de séparation.

I.12.3 Le rebouilleur

C'est un échangeur de chaleur, disposé au fond de la colonne, souvent de type à faisceaux tubulaires, dont le rôle est de porter, à l'ébullition, le liquide à distiller moyennement un échange de chaleur avec un fluide caloporteur. [14]

I.12.4 Ballon de reflux

C'est un ballon situé au-dessous du condenseur pour accumule les produits de tête condensés et surtout pour contenir le liquide de reflux. [14]

I.13 Les appareillages annexes

I.13.1 L'échangeur de chaleurs

Ils sont utilisés pour récupérer la chaleur, par exemple un échangeur préchauffe la charge d'alimentation par le liquide chaud du bas de la colonne afin de valoriser les rejets thermiques. [15]

I.13.2 Les pompes

Elles sont indispensables pour assurer la circulation des liquides au sien de l'installation et pour compenser les pertes de charges dans les différents éléments. [14]

I.13.3 Les appareils de mesure, de contrôle et de régulation

Pour éviter la perturbation des conditions de fonctionnements, certains appareils de contrôle sont à installer. Ces derniers permettent de suivre en temps réel l'évolution des différents paramètres opératoire (température, pression). Par conséquent, ils faciliteront l'intervention si l'incident qui survient risque d'altérer le bon fonctionnement. [14]

Chapitre II :

Distillation des

mélanges complexes

Introduction

Dans l'industrie, la majeure des processus de distillation implique plus de deux composants. Les séparations multi-composantes sont effectuées en utilisant le même type de colonnes de distillation, de rebouilleurs, de condenseurs, d'échangeurs thermiques... etc...

La séparation de ces constituants repose sur les mêmes principes que ceux qui ont été énoncés pour les mélanges binaires, bien que l'application en soit délicate. Si l'on excepte le cas des soutirages latéraux, la colonne répartit l'alimentation en un distillat en tête et un soutirât en bas de colonne. On se ramène au cas des binaires en faisant choix de deux constituants de volatilités voisines, les "constituants-clefs".

Dans le cas de mélanges multi-composants, il est nécessaire d'utiliser une approche analytique. Le schéma de séparation fait intervenir deux principaux composants du mélange. Le composant principal léger (Y_i) a une concentration limite maximale dans le résidu et le composant principal lourd (X_i) a une concentration limite maximale dans le distillat.

On applique plusieurs méthodes de raccourci sont utilisées pour effectuer des calculs dans des systèmes multi-composantes. Les méthodes de calcul qui permettent de connaître les valeurs conjuguées du taux de reflux et du nombre de plateaux théoriques nécessaires pour effectuer une séparation peuvent être rassemblées en deux groupes :

- Les méthodes dites abrégées (Short-cuts) ,
- Les méthodes dites progressives de calcul plateau par plateau.

Ceux-ci impliquent généralement une évaluation du nombre minimal de plateaux, du taux de reflux minimal et du nombre de plateaux au reflux fini pour des distillations simple. Bien que les méthodes informatiques rigoureuses soient disponibles pour résoudre des problèmes de séparation multi-composants, les méthodes approximatives sont utilisées en pratique. Une méthode approximative largement utilisée est généralement mentionnée comme la méthode de **FENSKE-UNDERWOOD- GILLILAND**.

II.1 La distillation des mélanges complexes : La méthode (Short-cuts)

Avant l'avènement de l'ordinateur numérique moderne, diverses méthodes de « short-cut » ont été développées pour simplifier la tâche de conception de colonnes multicomposants. Bien que des programmes informatiques soient normalement disponibles pour la résolution rigoureuse des équations MESH, les méthodes abrégées sont toujours utiles dans le travail de conception préliminaire et comme aide à la définition des problèmes pour la solution informatique. L'utilisation intelligente des méthodes de raccourcis peut réduire le temps et les coûts informatiques. [16]

Les méthodes de short-cut disponibles peuvent être divisées en deux classes :

1. Simplification des procédures rigoureuses étape par étape pour permettre aux calculs d'être faits à la main ou graphiquement. Des exemples typiques de cette approche sont les méthodes données par **Smith et Brinkley (1960)** et **Hengstebeck (1976)**.

2. Les méthodes empiriques, qui s'appuient sur les performances des colonnes opératoires, ou sur les résultats de conceptions rigoureuses. Des exemples typiques de ces méthodes **sont la corrélation de Gilliland et la corrélation d'Erbar-Maddox**

Ce chapitre développe une méthode approximative supplémentaire pour la conception préliminaire et l'optimisation de la distillation simple, appelée **la méthode Fenske-Underwood-Gilliland (FUG)**.

II.1.1 La méthode Fenske-Underwood-Gilliland (FUG).

Les méthodes approximatives continuent à être utilisées en pratique pour des buts divers, y compris la conception préliminaire, des études paramétriques pour établir des conditions de conception optimums et pour des études de synthèse de processus pour déterminer des ordres de séparation optimaux. Dans ce chapitre nous étudierons le calcul d'une colonne par la méthode approximative FUG qui est largement utilisée pour faire la conception préliminaire et l'optimisation de distillation simple.

La plus populaire de ces méthodes raccourcies est la méthode Fenske Underwood-Gilliland (FUG). Les hypothèses de base d'une telle méthode sont :

1. Le système est idéal.
2. Débordement molaire constant (comme dans la méthode de McCabe Thiele pour les mélanges binaires).

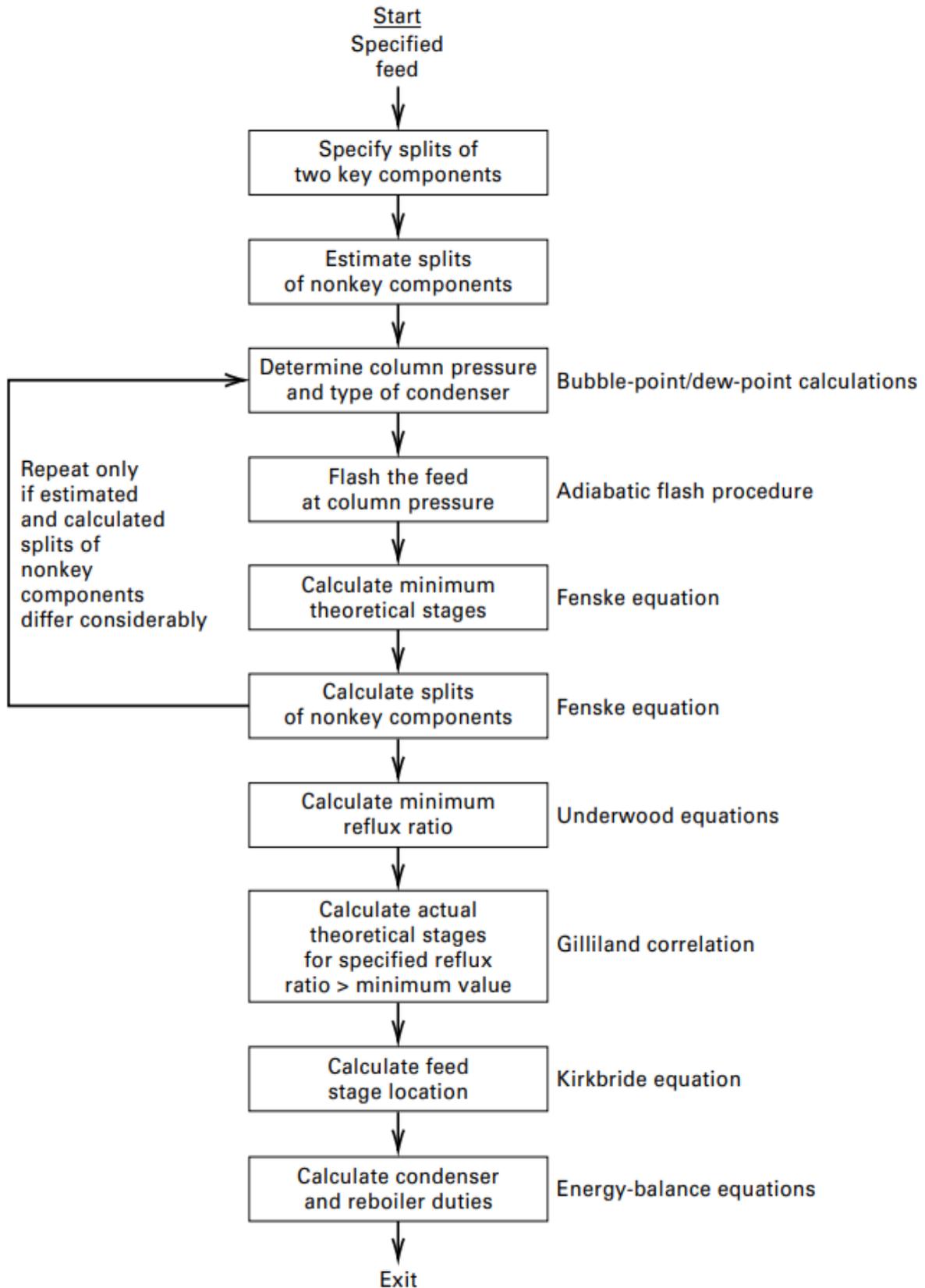
3. La séparation s'opère essentiellement entre le composant clé léger et le composant clé lourd.

La clé légère (**LK**) est le composant le plus léger apparaissant en bas et la clé lourde (**HK**) est le composant le plus lourd apparaissant en haut. Dans la méthode **FUG** :

1. L'équation de Fenske est utilisée pour calculer le nombre minimum de plateaux, **N_{min}** qui est le nombre de plaques requises pour effectuer une séparation spécifiée au reflux total, c'est-à-dire que la valeur minimale des équations de **N**.

2. L'équation d'Underwood est utilisée pour estimer le reflux minimum, **R_{min}**

3. La corrélation de Gilliland est utilisée pour calculer le nombre réel de plateaux, **N** (pour tout **R** donné), ou le taux de reflux, **R**, (pour tout **N** donné) en fonction des valeurs limites précédentes **N_{min}** et **R_{min}**



† Figure † II.I :Algorithm for multicomponent distillation by FUG method. [17]

II.1.2 Méthode de Fenske : "Fonctionnement à taux de reflux total" :

Dans la rectification on utilise deux méthode d'idéalisations du procédé permettant d'établir les cas limites du fonctionnement de la colonne, l'un des cas est le fonctionnement à reflux total qui correspondant à un nombre minimal de plateaux théoriques et l'autre est le fonctionnement à reflux minimal demandant la séparation spécifiée un nombre infini de plateaux.

A reflux total lorsque les concentrations de deux constituants (i et j) dans les produits obtenus (distillat et résidu), les volatilités relatives de ces constituants et le nombre minimal de plateaux est donné par la formule connue de Fenske.[18]

Fenske (1932) a été le premier à dériver une équation pour calculer le nombre minimum de plateaux pour la distillation multicomposant au reflux total. La dérivation était basée sur l'hypothèse que les étapes sont des étapes d'équilibre.

Pour un binaire, l'équation de Fenske permettant de calculer ce nombre minimum de plateaux dans une colonne fonctionnant à reflux total est donnée par :

$$N_{min} + 1 = \frac{\ln \frac{x_D(1-x_W)}{x_W(1-x_D)}}{\ln \alpha_{AB}} \quad (\text{II. 1})$$

$N_{min} + 1$: Représente le nombre d'étages théoriques total y compris le bouilleur.

Si on se place au dernier étage en haut de la colonne, $n = N_{min}$ on a alors

$$\left(\frac{x_{i,Nmin+1}}{x_{i,1}} \right) \left(\frac{x_{j,1}}{x_{j,Nmin+1}} \right) = \prod_{k=1}^{Nmin} \alpha_k \quad (\text{II. 2})$$

On considéré le couple de composés i (la cléf légère) et j (la cléf lourde) sur le plateau n, et on pose :

$x_{i, Nmin +1}$ et $x_{j, Nmin+1}$ les fractions molaires du reflux et égales à celles du distillat pour un reflux total $x_{i,D}$ et $x_{j,D}$.

$x_{i,1}$ et $x_{j,1}$ les fractions molaires en bas de colonne : $x_{i,B}$ et $x_{j,B}$

Si la volatilité du couple i-j reste constante dans la colonne, c'est-à-dire $\alpha_{ij} = \text{constante}$, alors :

$$\left(\frac{x_{i,N_{min}+1}}{x_{i,1}} \right) \left(\frac{x_{j,1}}{x_{j,N_{min}+1}} \right) = \alpha_{ij}^{N_{min}} \quad (\text{II. 3})$$

On obtient alors l'équation de Fenske suivante :

$$N_{min} = \frac{\log \left(\frac{x_{i,N_{min}+1}}{x_{i,1}} \right) \left(\frac{x_{j,1}}{x_{j,N_{min}+1}} \right)}{\log \alpha_{ij}} = \frac{\log \left(\frac{x_{i,D}}{x_{i,B}} \right) \left(\frac{x_{j,B}}{x_{j,D}} \right)}{\log \alpha_{ij}} \quad (\text{II. 4})$$

Une Forme souvent plus pratique de l'équation de Fenske utilise les débits plutôt que les fractions molaires.

$$\left(\frac{x_{i,N_{min}+1}}{x_{j,N_{min}+1}} \right) = \left(\frac{D \cdot x_{i,N_{min}+1}}{D \cdot x_{j,N_{min}+1}} \right) = \left(\frac{d_i}{d_j} \right) \text{ et } \left(\frac{x_{i,1}}{x_{j,1}} \right) = \left(\frac{b_i}{b_j} \right) \quad (\text{II. 5})$$

Si **D** et **B** sont les débits totaux de distillat et de résidu, on appelle d_i et b_i les débits molaires de chaque composé « i » dans le distillat et d_j et b_j ceux dans le résidu :

Et l'équation de Fenske s'écrit alors :

$$N_{min} = \frac{\log \left(\frac{d_i}{d_j} \cdot \frac{b_j}{b_i} \right)}{\log \alpha_{ij}} \quad (\text{II. 6})$$

Avec i = clé légère et j = clé lourde

II.1.3 Répartition des autres composés (non-clés)

Choisissons la clé lourde comme référence et utilisons la loi de Fenske pour les couples (i,r) où « i » est un composé non-clé :

$$\left(\frac{d_i}{b_i} \right) = \left(\frac{d_r}{b_r} \right) \cdot \alpha_{ir}^{N_{min}} \quad (\text{II. 7})$$

Or : $f_i = d_i + b_i$ avec f_i = débit molaire du composé i dans l'alimentation :

$$b_i = \frac{f_i}{1 + (d_r/b_r)(\alpha_{ir})^{N_{min}}} \quad (\text{II. 8})$$

$$d_i = \frac{f_i(d_r/b_r)(\alpha_{ir})^{N_{min}}}{1 + (d_r/b_r)(\alpha_{ir})^{N_{min}}} \quad (\text{II. 9})$$

II.1.4 Reflux minimal par la méthode de Underwood :

Le reflux minimum correspond au cas limite d'une colonne ayant un nombre infini de plateaux. C'est à dire qu'il existe dans la colonne une (ou plusieurs) région pour laquelle les courants qui entrent dans un plateau sont déjà à l'équilibre.

- Pour les binaires, cette situation correspondait à l'intersection ou à la tangence des droites opératoire et d'alimentation avec la courbe d'équilibre

- La détermination du reflux minimum pour les mélanges complexes résulte de la résolution d'un ensemble d'équation caractérisant des bilans matières, les relations d'équilibre et l'état thermodynamique de l'alimentation.

- Le développement des équations, long et fastidieux n'est pas présenté et nous allons simplement donner les relations obtenues par Underwood (ChemEng.Prog. 1948; 44 :603) dans le cas où il n'y a pas de composé distribué Distillation des mélanges complexe. [18]

La méthode consiste d'abord à trouver (par itération) la valeur du paramètre θ tel que:

$$\sum_{i=1}^n \frac{\alpha_{ir} z_i}{\alpha_{ir} - \theta} = 1 - q \quad (\text{II. 10})$$

Avec : $a_{HK} < \theta < a_{LK}$

et où :

z_i = Fraction molaire dans l'alimentation du composé i

LK = fraction de récupération du composant clé légère

HK = fraction de récupération du composant clé lourd

- n est le nombre de composants,
- α_{ir} est la volatilité relative moyenne du composant i par rapport au composant principal lourd r ,
- q est le nombre de moles du liquide saturé produit au plateau d'alimentation par mole de l'alimentation et
- θ est un paramètre, dont la valeur est une inconnue qui doit être déterminée par itérations successives. La valeur correcte de θ se situe entre la volatilité relative des deux composants principaux clé légère et clé lourde.

On choisit comme référence la clé lourde et les volatilités sont estimées à la température moyenne de la colonne. Le paramètre q , qui caractérise l'état thermodynamique de l'alimentation par rapport à ceux de la vapeur et du liquide

Puis, on utilise cette valeur de q pour trouver la valeur du reflux minimum $R_{min} = L/D$:

$$R_{min} + 1 = \sum_{i=1}^n \frac{\alpha_{ir} x_{iD}}{\alpha_{ir} - \theta} \quad (\text{II. 11})$$

Où x_{iD} est la fraction molaire du composant i dans distillat.

II.1.5 Taux de reflux optimal

A partir du taux de reflux opératoire choisi, l'étude du procédé de rectification montre qu'à chaque valeur du taux de reflux, correspond un nombre fini de plateaux théoriques et que ce nombre diminue quand le taux de reflux s'accroît. Pour cela on utilise la formule proposée par GILLILAND.

En général on utilise la règle suivante pour le choix du reflux réel d'opération [18] :

$$\frac{R}{R_{min}} = 1.3 \quad (\text{II. 12})$$

II.1.6 Méthode de Gilliland : "Nombre de plateaux théoriques à reflux optimal" :

Gilliland a proposé une corrélation empirique entre le taux de reflux, et le nombre de plateaux théoriques. Si « N » est le nombre de plateaux théorique, correspondant à un taux de reflux opératoire $(R)_{opt}$, les deux fonctions sont reliées entre elles par une courbe de corrélation.[6]

$$\frac{N - N_{min}}{N + 1} = \frac{R - R_{min}}{R + 1} \quad (\text{II. 13})$$

Les résultats de Gilliland ont été corrélés par Eduljee (Hydro. Proc. 1975; 54 (9) 120) suivant:

$$X = \frac{R - R_{min}}{R + 1} \quad (\text{II. 14})$$

$$Y = \frac{N - N_{min}}{N + 1} \quad (\text{II. 15})$$

$$Y = 0.75 - 0.75 X^{0.5668} \quad (\text{II. 16})$$

II.1.7 Position du plateau d'alimentation :

La relation de **Kirkbride** (1944) permet le calcul du rapport du nombre d'étages dans la zone de rectification, N_R , sur le nombre d'étages dans la zone d'épuisement N_S :

$$\frac{N_R}{N_S} = \left[\left(\frac{z_{HK}}{z_{LK}} \right) \left(\frac{x_{B,LK}}{x_{D,HK}} \right)^2 \left(\frac{B}{D} \right) \right]^{0.206} \quad (\text{II. 17})$$

La somme (N_R+N_S) étant connue, on trouve alors la position de l'alimentation.

Il faut retenir que la position optimale de l'alimentation est celle qui perturbe le moins le fonctionnement du plateau. [17]

II.2 Distillation multicomposants : solution rigoureuse

Avant les années 1950, les calculs de colonne étaient effectués à la main. Bien que des procédures de calcul rigoureuses aient été disponibles, elles étaient difficiles à appliquer pour toutes les colonnes, sauf pour les très petites. Les méthodes raccourcies étaient donc le principal outil de conception. Des procédures rigoureuses n'ont été utilisées que pour les petites colonnes ou pour les vérifications finales de la conception. Les imprécisions et les incertitudes dans les procédures de raccourci étaient généralement prises en compte par la sur conception.

L'introduction des ordinateurs a entièrement renversé la procédure de conception. Des calculs rigoureux, qui prenaient autrefois plusieurs jours, parfois des semaines, même pour une colonne relativement simple, peuvent maintenant être effectués rapidement et efficacement à l'aide d'un ordinateur. Il ne faut plus tolérer les imprécisions et les incertitudes inhérentes aux procédures raccourcies. Dans la pratique de la distillation moderne, les méthodes rigoureuses sont le principal outil de conception. [16]

L'utilisation des ordinateurs a également conduit à un développement rapide de procédures plus rigoureuses. Les méthodes rigoureuses développées dans les années 1930 ont été remplacées par des méthodes plus efficaces. De plus, des développements ont eu lieu pour permettre l'application de méthodes rigoureuses à de nombreux fractionneurs complexes, dont certains ne pouvaient pas être modélisés de manière adéquate par des méthodes raccourcies.

Avec la précision et les capacités supérieures de la rigueur moderne méthodes, une colonne ne doit pas être conçue sans elles. Un raccourci le calcul est moins précis et, dans certains cas, peut donner résultats trompeurs. Dans la plupart des travaux de conception de colonnes modernes, le rôle des calculs de raccourci se limite à éliminer les options de conception les moins souhaitables, à fournir au concepteur une estimation initiale pour l'étape rigoureuse et à dépanner la conception finale. Les méthodes rigoureuses sont utilisées comme conception principale et outil d'optimisation. [16]

Les étapes de base de toute procédure de solution rigoureuse seront :

1. Spécification du problème ; une spécification complète est essentielle pour les méthodes informatiques.
2. Sélection de valeurs pour les variables d'itération ; par exemple, les températures d'étage estimées et les débits de liquide et de vapeur (les profils de température et de débit de la colonne).
3. Une procédure de calcul pour la solution des équations d'étape.

4. Une procédure de sélection de nouvelles valeurs pour les variables d'itération pour chaque ensemble de calculs d'essai.

5. Une procédure pour tester la convergence ; pour vérifier si une solution satisfaisante a été trouvée. [19]

Il convient de considérer les méthodes disponibles sous les quatre rubriques suivantes :

1. Méthode Lewis-Matheson.
2. Méthode de Thiele-Geddes.
3. Méthodes de relaxation.
4. Méthodes d'algèbre linéaire. [19]

II.2.1 Modélisation mathématique des colonnes multi-étagées de séparation liquide-vapeur

La Figure II.II représente le schéma général d'une colonne de distillation comportant N plateaux théoriques. Le condenseur, quelque soit son type (partiel ou total), est l'étage n°1 et le rebouilleur l'étage n° N . L'étage n°2 est dit plateau de tête et l'étage $N-1$ est dit le plateau de fond.

Chaque plateau j est alimenté par un débit vapeur, V_{j+1} est un débit liquide L_{j-1} venant respectivement des deux plateaux adjacents $j+1$ et $j-1$. De même, quittant le plateau j un débit vapeur V_j et un autre liquide L_j pour alimenter respectivement les deux plateaux adjacents $j-1$ et $j+1$. [20]

Sur chaque plateau peut être défini une alimentation vapeur FV_j et une alimentation liquide FL , un soutirage liquide U_j , un soutirage vapeur W_j et une perte ou apport de chaleur Q_j (Figure 0.IV).

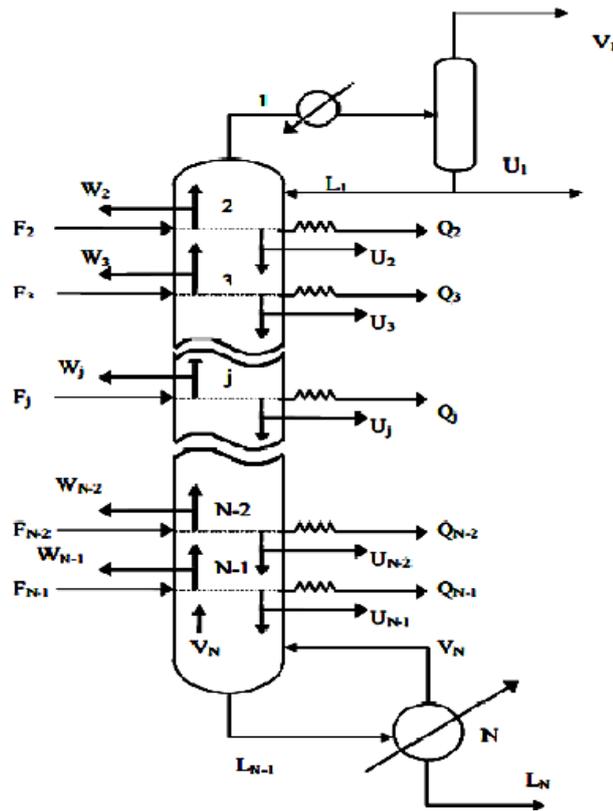


Figure II.II : Schéma général d'une colonne de distillation.

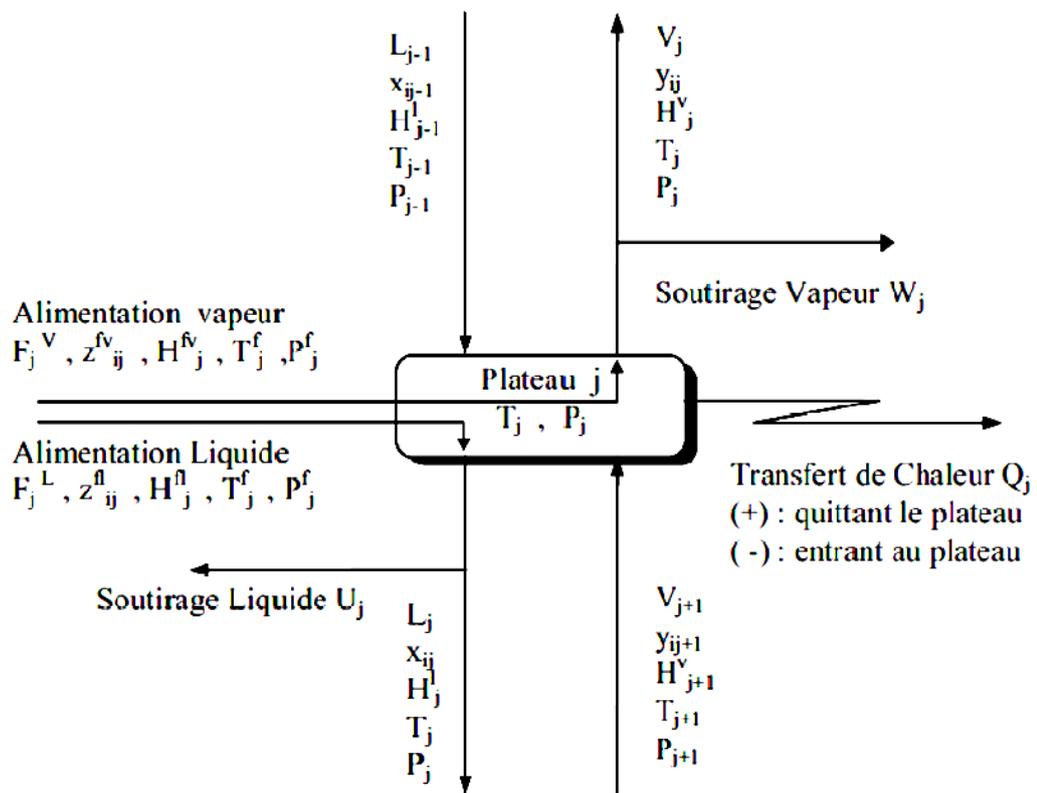


Figure II.III : Schéma général d'un plateau d'équilibre.

II.2.2 Formulation des équations du modèle

II.2.2.1 Hypothèses du modèle

Sur chaque plateau, on considère les équilibres suivants :

Équilibre mécanique : la pression de la phase vapeur est égale à la pression de la phase liquide

Équilibre thermique : la température de la phase liquide est égale à la température de la phase vapeur

Équilibre thermodynamique : égalité des fugacités dans chaque phase pour chaque constituant

On fait aussi l'hypothèse d'absence de réactions chimiques et que chacune des phases vapeur et liquide sont parfaitement agitées. [20]

II.2.2.2 Équations du modèle (MESH Equations)

A chaque plateau d'équilibre, on associe les quatre équations suivantes :

Équations M—Bilan matière pour chaque composant

$$M_{ij} = L_{j-1}x_{i,j-1} + V_{j+1}y_{i,j+1} + F_jz_{ij} - (L_j + U_j)x_{ij} - (V_j + W_j)y_{ij} = 0$$

Équations E - relation phase-équilibre pour chaque composant

$$E_{ij} = y_{ij} - K_{ij}x_{ij} = 0$$

Équations S—Somme des fractions molaires

$$(S_y)_j = \sum_{i=1}^c y_{ij} - 1.0 = 0$$

$$(S_x)_j = \sum_{i=1}^c x_{ij} - 1.0 = 0$$

Équation H—bilan énergétique

$$H_j = L_{j-1}h_{L,j-1} + V_{j+1}h_{V,j+1} + F_jh_{F_j} - (L_j + U_j)h_{L_j} - (V_j + W_j)h_{V_j} - Q_j = 0$$

Ces quatre équations sont désignées sous l'appellation M.E.S.H. Pour sa résolution, le modèle peut être formulé de deux façons selon qu'on utilise les fractions molaires ou les débits partiels. [17]

II.2.3 Approches fondamentales de la simulation des colonnes de séparation liquide-vapeur

La simulation des colonnes de séparation liquide vapeur à plateaux, a fait l'objet d'un nombre très important de travaux [21], une étude rétrospective, nous a permis d'identifier différents algorithmes de base. Aussi, nous avons pu constater que chacun de ces algorithmes se caractérise des autres par sa procédure de calcul et par l'application pour laquelle il est destiné. Toutefois, très peu de travaux [21, 22, 23, 16] ont été menés dans l'objectif de synthétiser ces différents algorithmes et de définir une approche fondamentale de résolution.

De ce fait, il nous est paru nécessaire d'établir une classification des différents algorithmes pour la résolution du modèle MESH. Cette classification nous permettra par la suite de comprendre les particularités de chaque approche et de préconiser leurs domaines d'applications appropriés.

II.2.4 Approche mathématique de la résolution du modèle MESH

Le modèle de la colonne est constitué d'un grand nombre d'équations algébriques non linéaires. Les mathématiques nous offrent plusieurs possibilités pour résoudre ce système d'équations [25, 26]. Parmi ces méthodes numériques, nous citerons :

- La substitution et l'élimination,
- Les méthodes directes (sans calcul des dérivées partielles),
- L'approche séquentielle,
- L'approche simultanée,

Les deux premières approches sont à éliminer car elles nécessitent des manipulations spéciales des équations qui sont impossibles à effectuer sur le modèle MESH. Par contre, les deux dernières sont retenues. L'approche séquentielle consiste à découpler le système d'équations en sous systèmes qui sont résolus séquentiellement selon une procédure itérative. L'approche des corrections simultanées consiste à résoudre toutes les équations du système simultanément (Figure II.IV) . Dans les paragraphes qui suivent, nous présenterons ces deux approches mathématiques appliquées à la résolution du système d'équations du modèle M.E.S.H. [20]

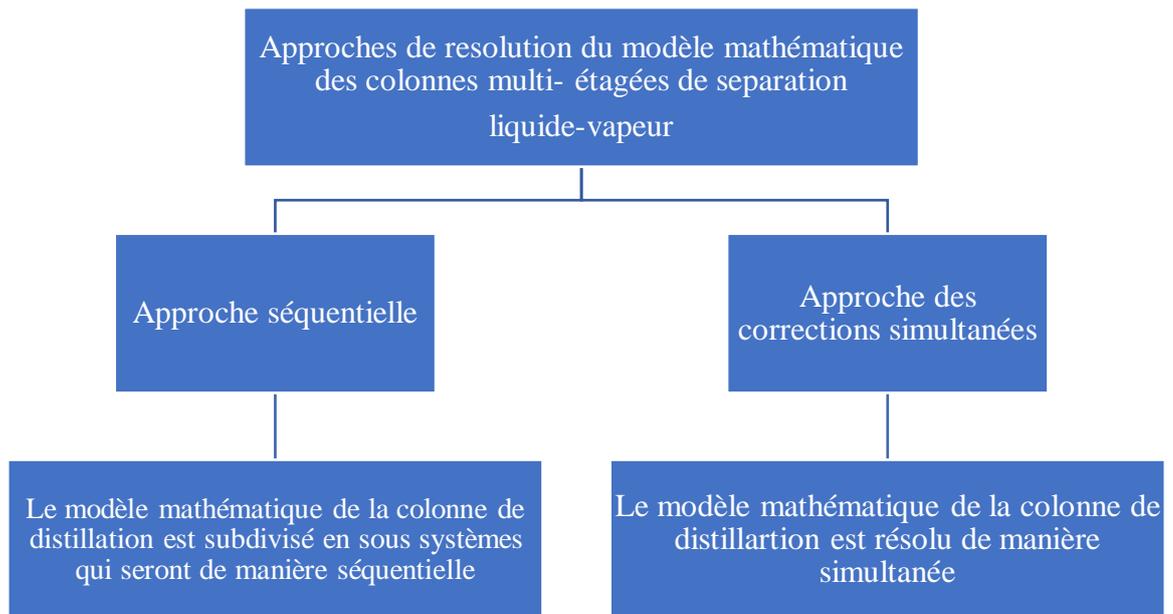


Figure † II.IV : Organigramme des approches de résolution du modèle mathématique des colonnes multi-étagées de séparation liquide-vapeur. [20]

II.2.5 Approche séquentielle

Elle consiste à fractionner le système MESH en sous-systèmes d'équations qui sont résolues séquentiellement. Les équations de bilan de matière sont résolues indépendamment pour générer les profils de distribution des compositions. Ensuite, les profils de température et de débits sont obtenus à partir des autres équations du modèle soit simultanément ou séparément. Dans l'approche séquentielle, un choix judicieux doit être porté sur quatre aspects importants pour la résolution du modèle, à savoir :

- Le choix des variables indépendantes,
- Le découplage du système d'équations en sous systèmes,
- L'association variable équations,
- L'ordre de résolutions.

Les trois principaux algorithmes de base de l'approche séquentielle sont :

- L'algorithme Bubble-Point,
- L'algorithme Sum-Rate,
- L'algorithme 2N-Newton.

Ces algorithmes ont connu beaucoup de modifications relatives à l'amélioration des propriétés de convergence et à la minimisation du temps de calcul. [20]

II.2.6 Les approches des corrections simultanées

Contrairement à l'approche séquentielle, l'approche des corrections simultanées consiste à résoudre l'ensemble des équations M.E.S.H simultanément. Dans l'approche des corrections simultanées, on doit tenir compte des trois points suivants :

- Le choix des variables indépendantes,
- L'arrangement des équations,
- La méthode numérique de résolution. [20]

Principaux algorithmes de l'approche des corrections simultanées

Plusieurs algorithmes de l'approche corrections simultanées ont été développés depuis les premiers travaux sur la simulation des colonnes de distillation. Les plus connus sont ceux de Naphtali et Sandholm [27] et de Goldstein et Stanfield [28]. Sur la base de ces deux algorithmes, d'autres auteurs ont développé des variantes améliorées. Nous citerons à titre d'exemple les travaux de Gallun et Steven [29]. De nos jours, les algorithmes de type « Inside Out » sont les plus utilisés pour la simulation des colonnes de séparation.

Chapitre III :

Calcul de la colonne

Introduction :

Notre travail dans ce chapitre est de vérifier les dimensions de la colonne par deux méthodes :

Une méthode approximative qui consiste à calculer les dimensions de la colonne .Elle permet de calculer le bilan matière et déterminer les différentes pressions et températures, cette méthode est basée sur les équilibres liquide-vapeur .

Une simulation HYSYS pour vérifier les paramètres et les paramètres de la colonne.

III.1 Données de départ

Le mélange d'alimentation suivant doit être séparé par distillation ordinaire à **120 psia** pour obtenir **92 %** en moles de **nC₄** dans le distillat liquide et **81,0 %** en moles de **iC₅** dans les queues.

L'alimentation est donnée sous forme de liquide à point de bulle .

la température de l'alimentation également = 180,8 °F = 82.22 °C

Pas de chute de pression au condenseur ou à l'étage. Par conséquent, la pression au fond également = **120 psia**.

La composition et les débits partiels de la charge sont regroupés dans le tableau III.1

N°		Alimentation		
		Constituants	Débit molaire (lbmol/h)	Fraction molaire
01	C ₃	Propane <i>C₃H₈</i>	5	0,5
02	iC ₄	Isobutane <i>iC₄H₁₀</i>	15	0,15
03	(LK)nC ₄	n-Butane <i>nC₄H₁₀</i>	25	0,25
04	(HK)iC ₅	Isopentane <i>iC₅H₁₂</i>	20	0,20
05	nC ₅	n-Pentane <i>nC₅H₁₂</i>	35	0,35
Σ totale			100	1

Tableau ↑ III.I : La composition de la charge.

III.2 Compositions imposées des courants sortants

Les compositions des deux courants, distillat (tête de colonne) et résidu (fond de colonne) sont précisées dans le tableau ↑ III.II

Les teneurs admises			
Dans le distillat		Dans le résidu	
Y_{nC4}	0.49	X_{nC4}	0.04
Y_{iC5}	0.07	X_{iC5}	0,34

Tableau † III.II : composition imposées des courants sortant.

III.3 Calcul de spécification des deux courants distillat (*D*) et Résidu(*R*)

Le constituant clé léger est nC_4 .

Le constituant clé lourd est iC_5 .

L'analyse des deux courants montre qu'il reste cinq titres à déterminer (5 inconnues) pour une spécification totale des deux courants. Les cinq équations nécessaires sont obtenues en écrivant les bilans macroscopiques des constituants :

$$L \cdot X_{LC3} = D \cdot Y_{C3} + R \cdot X_{BC3} \quad (III. 1)$$

$$L \cdot X_{LiC4} = D \cdot Y_{iC4} + R \cdot X_{BiC4} \quad (III. 2)$$

$$L \cdot X_{LnC4} = D \cdot Y_{nC4} + R \cdot X_{BnC4} \quad (III. 3)$$

$$L \cdot X_{LiC5} = D \cdot Y_{iC5} + R \cdot X_{BiC5} \quad (III. 4)$$

$$L \cdot X_{LnC5} = D \cdot Y_{nC5} + R \cdot X_{BnC5} \quad (III. 5)$$

En procédant par substitution, on arrive à résoudre progressivement le système d'équation . Les résultats de la résolution sont regroupés dans le tableau † III.III

Constituants	<i>D'</i> 46.725 lbmol/h		<i>R'</i> 53.275 lbmol/h	
	X_i	D_i	X_i	R_i
<i>C3H8</i>	0.107	5.000	0.00	0.000
<i>iC4H10</i>	0.32	15.000	0.00	0.000
<i>nC4H10</i>	0.49	23.125	0.04	1.875
<i>iC5H12</i>	0.07	3.6	0,34	16.400
<i>nC5H12</i>	0.00	0.000	0.64	35.000
Total	1.000	46.275	1.000	53.275

Tableau † III.III : Résultats de la résolution (en titre molaire et débit molaire) .

III.4 Détermination des paramètres opératoires de la colonne (Estimation des points de rosée et de bulle) :

III.4.1 La température au sommet de la colonne

Pour la vérification de la température au sommet de la colonne on utilise l'équation de l'isotherme de la phase vapeur au sommet de la colonne :

$$\sum x_i = \sum \frac{y_i}{K_i} = 1 \quad (\text{III. 6})$$

Connaissant la pression $P_s = 8,3 \text{ bars}$, on propose une température T_1 . A l'aide du monogramme de Scheibel et Jenny (annexe 01), on détermine les volatilités K_i et on calcul le terme $\sum y_i \cdot k_i$. On continue l'opération jusqu'à ce qu'on obtienne l'égalité $\sum y_i \cdot k_i = 1$.

Constituants	70 °C			60 °C	
	x_d	K_i	y_i/K_i	K_i	y_i/K_i
C ₃	0.107	2.6	0.04	2.20	0.24
iC ₄	0.32	1.3	0.25	1.06	0.35
(LK)nC ₄	0.49	0.88	0.6	0.77	0.42
(HK)iC ₅	0.07	0.46	0.04	0.36	0.01
nC ₅	0.00	/	/	/	/
			$\sum y_i \cdot k_i = 0.94$	$y_i \cdot k_i = 1$	

Tableau † III.VI: lectures effectuées à partir du Monogramme de Scheibel et Jenny.

III.4.2 La température au fond de la colonne

On procède de la même façon mais en utilisant l'équation de l'isotherme de la phase liquide au fond de la colonne :

$$\sum y_i = \sum K_i \cdot x_i = 1 \quad (\text{III. 7})$$

Constituants	100 °C			110°C	
	x_d	K_i	y_i/K_i	K_i	y_i/K_i
C_3	/	/	/	/	/
iC_4	/	/	/	/	/
(LK) nC_4	0.02	1.85	0.04	2.1	0.04
(HK) iC_5	0.34	0.94	0.32	1.1	0.37
nC_5	0.64	0.82	0.52	0.96	0.61
			$\sum y_i \cdot k_i = 0.88$	$y_i \cdot k_i = 1.02$	

Tableau III.V : lectures effectuées à partir du Monogramme de Scheibel et Jenny.

III.4.3 Calcul des volatilités relatives α :

On calcule les volatilités relatives des constituants aux différentes zones de la colonne en utilisant l'équation :

$$\alpha_i = \frac{K_i}{K_{HK}} \quad (\text{III. 8})$$

K_i : constante d'équilibre de l'élément i .

K_{HK} : constante d'équilibre de le constituant clé lourd iC_5 .

III.4.4 Estimation de la volatilité relative moyenne

La volatilité K_i change avec la température ; de même pour la volatilité relative. Par conséquent, on est amené à considérer une volatilité moyenne. Cette moyenne peut être estimée de différentes façons :

$$\text{Valeur de la volatilité à la température moyenne : } T_{moy} = \frac{T_{tête} + T_{pied}}{2} \quad (\text{III. 9})$$

$$\text{Moyenne arithmétique : } \bar{\alpha} = \frac{\alpha_{tête} + \alpha_{pied}}{2} \quad (\text{III. 10})$$

Moyennes géométriques de la volatilité :

$$\bar{\alpha}_{geom} = (\alpha_{tête} \cdot \alpha_{pied})^{\frac{1}{2}} \quad (\text{III. 11})$$

$$\bar{\alpha}_{geom} = (\alpha_{tête} \cdot \alpha_{alim} \cdot \alpha_{pied})^{\frac{1}{3}} \quad (\text{III. 12})$$

Constituants	Rectification		épuisement		α_{geom}
	K_i	α_i	K_i	α_i	
C ₃	2.1	5.24	3.88	3.63	4.36
iC ₄	1.056	5.63	2.26	2.12	2.36
(LK)nC ₄	0.818	2.04	1.863	1.74	1.88
(HK)iC ₅	0.401	1.00	1.068	1.00	1.00
nC ₅	0.329	0.82	0.922	0.86	0.84

Tableau III.VI : Volatilités relative.

III.5 Détermination du nombre de plateaux théoriques. Méthode de F.U.G

III.5.1 Détermination de N_{min} :

La formule de Fenske est appliquée l'équation (III.13) et aux deux éléments clés nC_4H_{10} (légère) et iC_5H_{12} (lourd). L'équation de Fenske permettant de calculer ce nombre minimum de plateaux dans une colonne fonctionnant à reflux total est donnée par :

$$N_{min} = \frac{\log \left[\frac{d_{nC4} b_{iC5}}{d_{iC5} b_{nC4}} \right]}{\log(\alpha_{nC4,iC5})_{geom}} = \frac{\log \left[\frac{23.125 \cdot 16.4}{3.6 \cdot 1.875} \right]}{\log 1.88} = 6.38 \quad (III.13)$$

III.6 Répartition des autres composés (non – clés)

Pour calculer la distribution des composants non clés au reflux total, utilisez pour les composants clés plus légers que légers, LK, Eq. (II.9), et utilisez l'équation. (II.8) pour la clé plus lourde que lourde, HK, avec iC₅ comme composant de référence, r, et la valeur ci-dessus de N_{min} .

On obtient les résultats suivants :

Constituant	Alimentation	Distillat	Résidu
C ₃	5	5.000	0.000
iC ₄	15	14.60	0.4
(LK)nC ₄	25	22.9	2.1
(HK)iC ₅	20	3.70	16.3
nC ₅	35	2.7	32.3
Totale (lbmol/h)	100	48.9	51.1

Tableau III.VII : les compositions de différents courants.

III.7 Calcul de taux de reflux minimal :

Le taux de reflux minimum correspond au cas limite d'une colonne ayant un nombre infini de plateaux. Sa détermination pour les mélanges complexes résulte de la résolution d'un ensemble d'équation caractérisant des bilans matières, les relations d'équilibre et l'état thermodynamique de l'alimentation.

Dans le présent travail, la charge à traiter est introduite dans la colonne sous forme de liquide saturé (porté à sa température d'ébullition, [$q = 1$]).

L'état thermodynamique de l'alimentation	valeur du paramètre q
liquide en ébullition	1
vapeur saturante	0
liquide sous-refroidi	$1 + \frac{T_{éb} - T_A}{\Delta H_{VAP}}$
vapeur surchauffée	$1 + \frac{C_p(T_r - T_A)}{\Delta H_{VAP}}$

Tableau III.VIII : les valeurs du paramètre q .

Les itérations de la résolution par approximations successives sont regroupées dans le **Tableau 0.XI**

Constituants	x_i	α_i	$x_i \cdot \alpha_i$	θ		
				1.5	1.3	1.317
C_3	0.05	4.36	0.218	0.076	0.071	0.071
iC_4	0.15	2.36	0.356	0.414	0.336	0.341
$(LK)nC_4$	0.25	1.88	0.47	1.237	0.81	0.835
$(HK)iC_5$	0.20	1.00	0.20	-0.40	-0.666	-0.631
nC_5	0.35	0.84	0.294	-0.445	-0.639	-0.616
Σ totale				0.882	-0.088	0.00

Tableau † III.IX : résultats des itérations.

Les résultats nécessaires à l'application de l'équation (II.10) pour le calcul de R_{min} sont regroupés dans le tableau III.X

Constituants	x_i	α_i	$x_i \cdot \alpha_i$	
C_3	0.102	4.36	0.44472	0.146
iC_4	0.298	2.36	0.710328	0.681
$(LK)nC_4$	0.468	1.88	0.87984	1.563
$(HK)iC_5$	0.0756	1.00	0.0756	-0.238
nC_5	0.055	0.84	0.0462	-0.0968
Σ totale = $R_{min}+1$				2.0486
R_{min}				1.0486

Tableau † III.X: calcul de R_{min} .

La dernière étape consiste à calculer :

le taux de reflux opératoire ($R_{opér.}$) à partir de la relation usuellement utilisée (provenant de l'analyse technico-économique) :

$$R_{opér.} = 1,2 R_{min} = 1.2(1.0486) = 1.258$$

le nombre de plateaux (étages) théoriques N nécessaires en utilisant ou le diagramme de Gilliland ou la corrélation d'Eduljee.

L'ensemble des résultats de cette dernière étape est récapitulé dans le tableau III.XI.

L'état thermodynamique de l'alimentation.	$Ropér$	$X = \frac{R - R_{min}}{R + 1}$	$Y = 0,75 - 0,75 X^{0,5668}$	$N = \frac{Y + N_{min}}{1 - Y}$
liquide à point de bulle	1.258	0.07676	0.57495	16.023

Tableau † III.XI : récapitulation des résultats.

III.8 Position du plateau d'alimentation :

En utilisant la distribution de Fenske, $D = 48,9$ lbmol/h et $B = 51,1$ lbmol/h

$$\frac{N_R}{N_S} = \left[\left(\frac{z_{iC5.F}}{z_{nC4.F}} \right) \left(\frac{x_{nC4.F}}{x_{iC5.F}} \right)^2 \left(\frac{B}{D} \right) \right]^{0.206} = \left[\left(\frac{0.20}{0.25} \right) \left(\frac{0.041}{0.075} \right)^2 \left(\frac{51.1}{48.9} \right) \right]^{0.206} = 0.721$$

La somme ($N_R + N_S$) étant connue, on trouve alors la position de l'alimentation.

Donc, la position du plateau d'alimentation = 6.5

III.9 Comparaison entre les valeurs de la simulation et le calcul analytique :

Les tableaux ci-dessous récapitules la comparaison entre les valeurs trouvées analytiquement et celles simulées .

Constituants	Distillat		Résidu	
	analytique	simulé	analytique	simulé
C₃	5.00	4.9975	0.000	0.0025
iC₄	14.60	14.6505	0.4	0.3494
(LK)nC₄	22.9	22.8977	2.1	2.1023
(HK)iC₅	3.7	3.6543	16.3	16.3457
nC₅	2.7	2.57	32.3	32.43
∑ totale	48.9	48.77	51.1	51.230

Tableau † III.XII : Tableau comparatif des résultats (Composition molaire du distillat et du résidu).

Constituants	Distillat		Résidu	
	analytique	simulé	analytique	simulé
C ₃	0.102	0.1025	0.000	0.000
iC ₄	0.298	0.3004	0.00782	0.0068
(LK)nC ₄	0.468	0.4695	0.041	0.041
(HK)iC ₅	0.0756	0.0749	0.3189	0.3191
nC ₅	0.055	0.0527	0.632	0.6330
Σ totale	1.000	1.00	1.000	1.000

Tableau † III.XIII : Tableau comparatif des résultats (Composition molaire du distillat et du résidu).

Constituants	Distillat		Résidu	
	analytique	simulé	analytique	simulé
C ₃	2.100	2.202	3.880	3.914
iC ₄	1.056	1.103	2.260	2..253
(LK)nC ₄	0.818	0.8595	1.863	1.860
(HK)iC ₅	0.401	0.4142	1.068	1.043
nC ₅	0.329	0.3516	0.922	0.9194

Tableau † III.XIV : Tableau IV-4 : Tableau comparatif des résultats (les valeurs de k).

paramètres	Valeurs Calculé (méthode approximative)	Simulé (méthode précise)
Température de tête (°C)	60	62.52
Température de fond (°C)	110	109.6
le nombre de plateaux <i>N</i>	16.023	15.236
Le nombre minimum de plateaux <i>N_{min}</i>	6.38	6.151
Le taux de reflux minimum <i>R_{min}</i>	1.048	1.083
Le taux de reflux <i>R</i>	1.258	1.3
Position du plateau d'alimentaion	6.5	6.544

Tableau † III.XV : Tableau comparatif des résultats.

Discussion

Les résultats sont presque identiques en ce qui concerne le calcul des débits molaires et massiques ainsi que les compositions, de même pour les nombres d'étages théoriques et le plateau d'alimentation.

A partir du tableaux ci-dessus, nous remarquons que l'erreur est très faible. De cela, nous concluons que les valeurs obtenues par la simulation et les calculs analytiques sont très proches

Chapitre IV :
Simulation de la
colonne

Introduction :

Les méthodes de simulation, conçues pour être utilisées en statistique et en recherche opérationnelle, ont connu et connaissent encore un développement rapide dû à l'extraordinaire évolution des ordinateurs. Des applications se rencontrent tant dans l'industrie qu'en économie, ou encore en sciences sociales, en physique des particules, en astronomie et dans de nombreux autres domaines.

Dans beaucoup de situations, que ce soit de la vie courante ou dans la recherche scientifique, le chercheur est confronté à des problèmes dont il recherche des solutions sur la base de certaines hypothèses et contraintes de départ. Pour résoudre ce type de problème, il existe des méthodes analytiques applicables à des situations où le modèle permet de traiter les différentes variables par des équations mathématiquement maniables, et des méthodes numériques où la complexité du modèle impose un morcellement du problème, notamment par l'identification des différentes variables qui entrent en jeu et l'étude de leurs interactions. Cette dernière approche s'accompagne souvent d'une importante masse de calculs. Les techniques de simulation sont des techniques numériques : Simuler un phénomène signifie essentiellement reconstituer de façon fictive son évolution.

L'avantage majeur de la simulation est la fourniture d'un bon aperçu du comportement du système réel. Cet aperçu peut être difficile de l'avoir à travers l'expérience et l'intuition seule, en particulier pour les systèmes complexes avec plusieurs variables interactives. Dès que le modèle mathématique répond aux ajustements de changement des paramètres comme un procédé réel, la simulation peut être classée comme une méthode commode qui ne coûte pas chère et sans danger pour la compréhension du comportement du procédé réel et sans intervention sur le procédé en cours de fonctionnement.

Il existe un très grand nombre de logiciels de simulation des procédés chimiques. On présente une liste non-exhaustive des logiciels les plus utilisés au niveau mondial tel que : (Aspen), (Chemcad), (DesignII), (Hysys), (Ideas), (Indiss), (Prosim), (ProII), (Sim42). [29]

IV.1 Définition de simulation

La simulation est définie comme étant la représentation d'un phénomène physique à l'aide de modèles mathématiques simples permettant de décrire son comportement. Ces modèles sont basés sur la vérification des phénomènes de transfert de masse, d'énergie et de quantité de mouvement qui se produisent dans les différentes opérations unitaires .

IV.2 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, ... 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. [30]

Tout simulateur industriel de procédés chimiques est organisé autour des modules suivants :

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 des 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, ...[30]

IV.3 Type de simulation

On peut distinguer principalement deux types de simulation dans le cas des procédés chimiques :

IV.3.1 La simulation statique (steady state)

La simulation statique a pour caractéristique fondamentale d'être dédiée aux calcul de bilan matière et enthalpique ainsi qu'aux calculs d'équilibres entre phases. Les performances des appareils sont estimées à partir des valeurs fournies par l'utilisateur tout en calculant l'évolution du système en régime stationnaire.

Le procédé est décomposé en blocs représentant les différentes opérations unitaires mises en œuvre. Les blocs sont liés entre eux par des flux de matière ou d'énergie.

IV.3.2 La simulation dynamique (transient state)

La simulation dynamique d'un procédé vise à définir les propriétés des courants en fonction du temps, pendant des situations transitoires où le régime n'est pas stable.

Par les moyens de simulation dynamique, il est possible de suivre le comportement des variables principales du procédé quand elle sont sujettes de perturbations quelconque dans les opérations industrielles [31].

IV.4 Définition du logiciel Aspen HYSYS

Aspen HYSYS est un outil de modélisation de processus de simulation en régime permanent, la conception performance, le suivi, l'optimisation et la planification des activités pour les produits chimiques, les produits chimiques de spécialité, la pétrochimie et les industries et la métallurgie. [32]

HYSYS n'est pas le logiciel de simulation le plus flexible, ni le plus utilisé dans l'industrie, mais il a l'avantage d'être convivial et facile à utiliser une fois que les éléments de base sont compris. HYSYS a été développé pour l'industrie du pétrole, bien qu'il soit utilisé pour d'autres types de procédés chimiques.

Les simulations sont accomplies en utilisant les outils des menus. En plus, il dispose d'une interface graphique pour la construction des diagrammes du procédé (PDF – Process Flow Diagrams).

IV.5 Les concepts de la base du simulateur HYSYS

HYSYS est un simulateur de conception orientée-objets. Tout changement spécifié sur un élément est répercuté dans tout le modèle. C'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. Deuxièmement, il allie le concept d'opérations modulaires à celui de résolution non-séquentielle. 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. [33]

« Flowsheet » : c'est un ensemble d'objets « Flowsheet Elements » (courants de matière, d'énergie, d'opérations unitaires, de variables opératoires) qui constituent tout ou une partie du procédé simulé et qui utilisent la même base de données thermodynamique « Fluid Package ». Ce simulateur possède une Architecture Multi-Flowsheet : il n'y a pas de limite par rapport au nombre de Flowsheets. On peut préalablement construire des Flowsheets pour les utiliser dans une autre simulation, ou organiser la description de procédés complexes en le scindant en sous-Flowsheets qui sont des modèles plus concis (ceci permet de hiérarchiser un processus très complexe). Il possède un certain nombre d'entités particulières : un « Process Flow Diagram » (PFD), un « Workbook ». [33]

« Fluid Package » : il permet de définir les composants chimiques présents dans le procédé simulé et leurs 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. « Property view » : il contient l'information décrivant un objet (opération ou courant). « Simulation Case » (fichier de simulation) : c'est l'ensemble des « Fluid Packages » « Flowsheets » et « Flowsheet Elements » qui constituent le modèle. [33]

IV.6 Structure générale du HYSYS

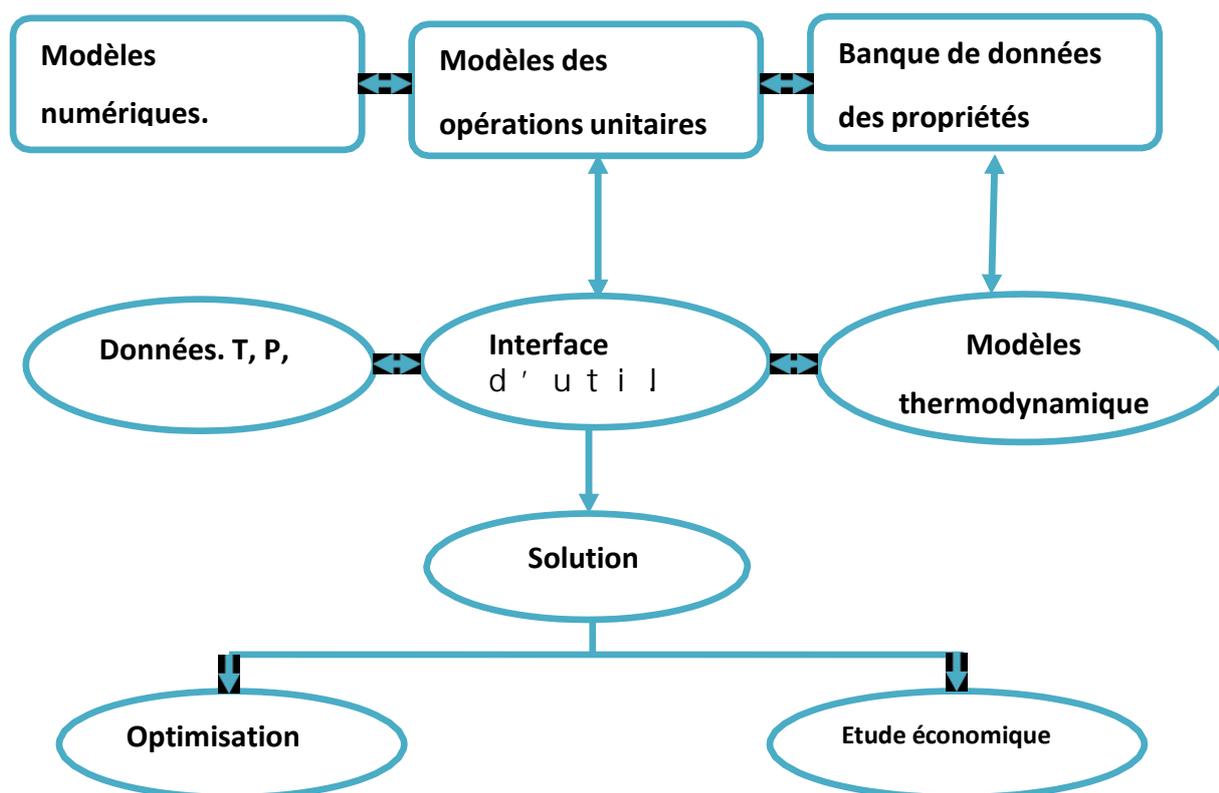


Figure IV.I : Structure générale du HYSYS [32].

IV.7 Le Choix du modèle thermodynamique

Une méthode thermodynamique est un ensemble de propriétés physico-chimiques permettant la modélisation d'un système afin de mener une étude prédictive sur la qualité et la quantité autour de ce système. Les méthodes thermodynamiques existent sous deux formes notamment le modèle de coefficient d'activité et le modèle des équations d'états.

Le travail de la simulation commence par le choix du modèle thermodynamique convenable à notre système, et qui assure le minimum d'écart de résultats par apport aux données de design.

IV.7.1 Les équations d'état (EoS)

Les équations cubiques d'état sont largement utilisés dans la simulation de processus et les calculs d'équilibre liquide-vapeur ont été appliquées à la représentation de propriétés de composés purs et de mélanges. L'historique de l'apparition de ces équations d'état remonte en 1662. La loi de Boyle était la première expression d'une équation d'état, le physicien et le chimiste irlandais Robert Boyle a exécuté une série d'expériences. Il a noté que le volume du gaz a varié inversement avec la pression ($PV = \text{constant}$). Cette relation a été aussi attribuée à Edme Mariotte et appelée la loi de Mariotte. Cependant, le travail de Mariotte n'a pas été publié jusqu'à 1676 [34].

Les modèles thermodynamiques basés sur les équations d'état sont utilisés pour le calcul des systèmes d'hydrocarbure et des systèmes de faible non idéalité. Ils peuvent être utilisés pour calculer des propriétés thermodynamiques telle que la constante d'équilibre K , l'entropie, l'enthalpie et la densité. Leurs supériorités par rapport aux autres modèles résident dans le fait de l'utilisation des coefficients d'interaction binaires. [35].

IV.7.1.1 Equation de REDLICH-K WONG (RK):

Considérer comme la plus simple des équations d'état, elle est très utilisée pour prédire d'état de la phase vapeur. [36]

$$R = \frac{RT}{V - b} - \frac{a}{\sqrt{T} \frac{1}{V(V + b)}} \quad (\text{III. 1})$$

Où \mathbf{a} et \mathbf{b} sont uniquement fonction des composés chimiques, et de la composition, ainsi :

$$\begin{cases} \mathbf{a} = \mathbf{a}^* \frac{R^2 T_c^{2.5}}{P_c} \\ \mathbf{b} = \mathbf{b}^* \frac{R^2 T_c}{P_c} \end{cases} \quad (\text{III. 2})$$

Avec $\mathbf{a}^* = 0.4278023$ et $\mathbf{b}^* = 0.08664035$.

IV.7.1.2 Equation de SOAVE-REDLICH-KWONG (SRK):

Cette équation modifiée celle de REDLICH-KWONG, par l'introduction d'une fonction (T) qui dépend du facteur acentrique. [37]

L'équation de SOAVE est de la même forme générale :

$$R = \frac{RT}{V - b} - \frac{a(T)}{V(V + b)} \quad (\text{III. 3})$$

SOAVE a introduit les relations suivantes pour exprimer la fonction (T) :

$$a(T) = a_c a(T_R) \quad (\text{III. 4})$$

Avec :

$$a(T_R) = \left(1 + m(1 - \sqrt{T_R})\right)^2 \quad (\text{III. 5})$$

IV.7.1.3 Equation d'état de PENG-ROBINSON (1976) :

L'équation de PENG-ROBINSON diffère de l'équation de SOAVE par l'expression du terme d'attraction. Elle a été introduite en vue d'améliorer les résultats obtenus par l'équation de SAOVE, notamment en ce qui concerne le calcul des densités en phase liquide, sans modifier le nombre de paramètres :

$$R = \frac{RT}{V - b} - \frac{a}{V^2 + 2Vb - V^2} \quad (\text{III. 6})$$

Pour un corps pur, les paramètres a et b sont calculés à partir des coordonnées du point critique (mesurables expérimentalement) selon :

$$a = 0.45724 \frac{R^2 T_c^2}{P_c} \alpha \quad (\text{III. 7})$$

$$b = \frac{0.077796 RT_c}{P_c} \quad (\text{III. 8})$$

L'équation de Peng-Robinson est recommandée pour les calculs d'équilibres liquide-vapeur des hydrocarbures sous pression (application en pétrochimie, au gaz naturel).

Ses résultats sont comparables à l'équation SRK. Avec cette dernière, l'équation de Peng-Robinson est essentielle et relativement irremplaçable pour les calculs d'équilibres liquide-vapeur sous pression. [37]

IV.7.2 Modèles d'activités

En thermodynamique, l'activité chimique d'une espèce chimique exprime l'écart entre les propriétés de cette espèce pure ou dans un mélange réel et les propriétés de cette même espèce dans un état standard (sous 1bar et 25°C) à la même température. La notion activité chimique est surtout employée pour les phases liquide et solide.

L'approche « Activité » est une approche plus empirique que les équations d'états. 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.

Ces modèles sont surtout recommandés pour les solutions non idéales comportant des constituants polaires (acides, alcool). 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. [32]

Exemple de modèles d'activité

UNIQUAC.

NRTL.

MARGULES.

WILSON.

IV.7.3 Ensemble de méthodes

IV.7.3.1 Modèle Chao Seader

Le modèle Chao-Seader est une ancienne méthode semi-empirique datant de 1961. Cette méthode est souvent utilisée pour calculer l'équilibre liquide-vapeur pour les hydrocarbures lourds et l'hydrogène, où la pression est moins de 1500 psia et une température entre -17,78°C et 260°C

La méthode de Chao-Seader (CS) est la combinaison d'un ensemble de méthodes couplée à une corrélation (option set dans les logiciels de thermodynamique).

Dans la méthode de Chao-Seader, la phase gaz est modélisée par l'équation d'état de Redlich-Kwong, et la phase liquide est modélisée par la théorie des solutions régulières de Scatchard-Hildebrand. [36]

IV.7.3.2 Modèle Grayson Streed

La méthode Grayson-Streed (GS) est une méthode plus vieille, semi-empirique. La corrélation est une extension de la méthode Chao-Seader avec accentuation spéciale sur l'hydrogène. Cette méthode a été adoptée pour les systèmes appliquant des hautes pressions et température [38].

La corrélation GS est recommandée pour simuler des systèmes d'hydrocarbures lourds avec un teneur en H₂ élevé, tel que les unités de l'hydrotraitement. La corrélation GS peut être utilisée pour la simulation des unités de Topping et les fractions lourdes sous vide, et pour le calcul de fugacités de la phase liquides pour N₂, CO₂ et H₂S.

IV.8 Problématique

Le modèle de simulation consiste en un groupe d'équations qui caractérisent le comportement des unités opérationnelles dans un processus. Ces équations ont une quantité considérable de termes liés aux propriétés physiques et thermodynamiques des composants et des mélanges impliqués. Il est donc indispensable d'inclure dans le cas de simulation un groupe d'équations pour le calcul de ces propriétés. Le groupe de variables à spécifier comprend des valeurs de température, de pression, de composition et certaines valeurs empiriques pour chacun des composants dans tous les flux de processus. Tout cas de simulation réalisé nécessite de connaître les valeurs des propriétés physico-chimiques et thermodynamiques du mélange. Ceci est nécessaire pour tous les composants à utiliser dans le processus. [39].

Les valeurs sont nécessaires pour toutes les conditions—composition, pression et température qui peuvent apparaître dans le fonctionnement normal d'une installation industrielle. [39].

Dans l'industrie, cette situation est en effet peu susceptible de se produire en raison du dynamisme et de la grande quantité de valeurs étudiées [40].

Une bonne sélection des techniques sera essentielle pour une analyse précise des dispositifs et flux présentés dans ce cas de simulation. Il ne suffit pas d'avoir le simulateur le plus sophistiqué disponible sur le marché, si un mauvais choix de méthode est fait, dans ce cas, des résultats erronés ou imprécis seront jamais obtenus.

Lorsqu'une option thermodynamique est sélectionnée, le modèle et les autres modèles associés sont utilisés pour le calcul des propriétés thermodynamiques et de transport. Ces derniers sont nécessaires pour développer le cas de simulation.

Dans l'industrie pétrolière, les équations d'état (EOS) ont joué un rôle central dans la modélisation thermodynamique de l'équilibre vapeur-liquide (LVE) des hydrocarbures (HC). Néanmoins, les EOS ont tendance à offrir des résultats inexacts dans certaines conditions.

Pour les applications pétrochimiques, pétrolières et gazières, en particulier une distillation primaire de pétrole brut (Topping), un ensemble des logiciels de simulateurs recommande la sélection du package thermodynamique basé sur l'EOS Peng-Robinson (PR)

Les coupes de gaz naturel et de pétrole sont composées principalement pour les hydrocarbures. Ces mélanges complexes sont traités comme des "pseudocomposants". Généralement, les modèles thermodynamiques sont utilisés pour les applications de raffinage du pétrole brut. Dans le cas particulier du raffinage primaire, un autre ensemble de simulateurs recommande le package thermodynamique Chao-Sea (CS).

Dans cette partie, on a essayé Utiliser la corrélation Chao-Seader ou Grayson-Streed pour les propriétés thermodynamiques afin de calculer les compositions des produits, les températures des étages, les débits et les compositions inter-étages, le service du rebouilleur et le service du condenseur pour les spécifications de distillation et Comparer les résultats.

IV.9 Méthode de détermination de travaille par HYSYS :

La simulation de procédé par hysys a été réalisé en passant par les étapes suivantes :

Commencer une nouvelle tâche

Pour créer un nouveau cas, il suffit de sélectionner New Case dans le menu File.

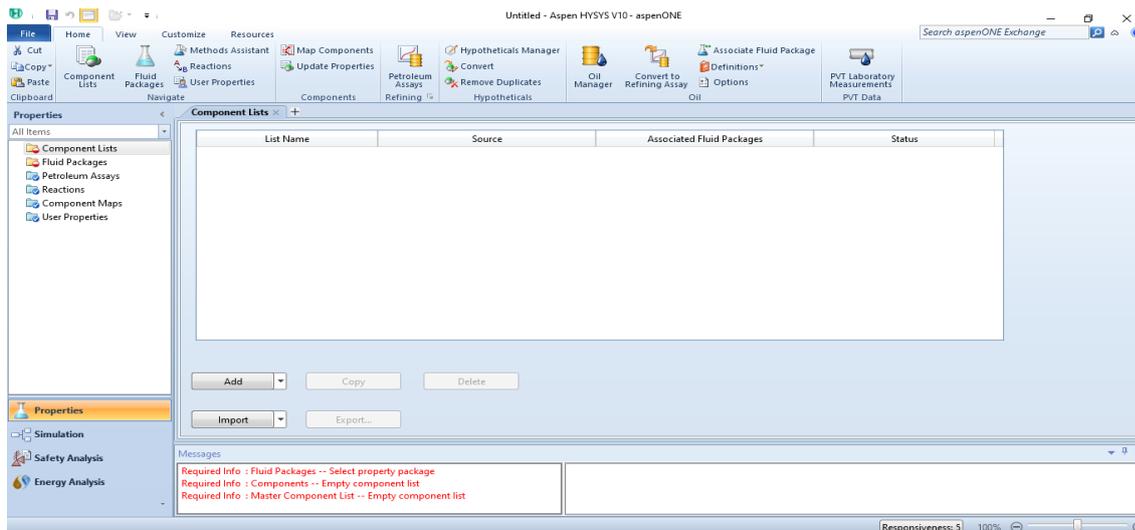


Figure IV.II : New Case.

Choix des composés du procédé

L'étape suivante est l'introduction des composants. Sélectionner la page Components, en cliquant sur son signet. Pour sélectionner les composants désirés pour la simulation, une des possibilités est de cliquer deux fois sur le composant dans la liste, il est ainsi transféré directement dans la Current Component List.

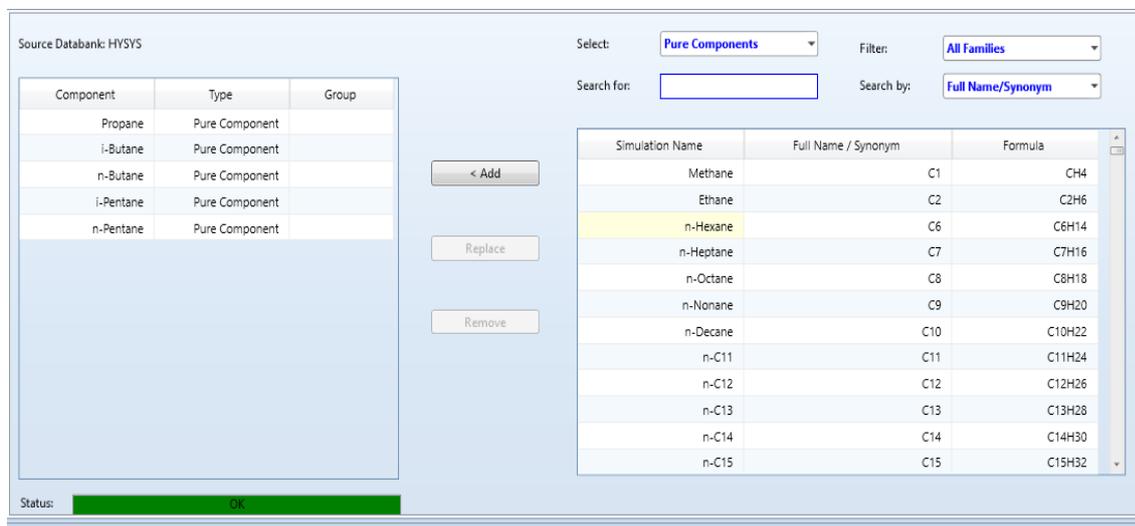


Figure IV.III : Choix des composés.

Créer un Fluid Package.

Presser la touche **Add** pour créer un Fluid Package : choisir l'équation d'état voulue. Dans notre cas, ce sera **Peng - Robinson**.

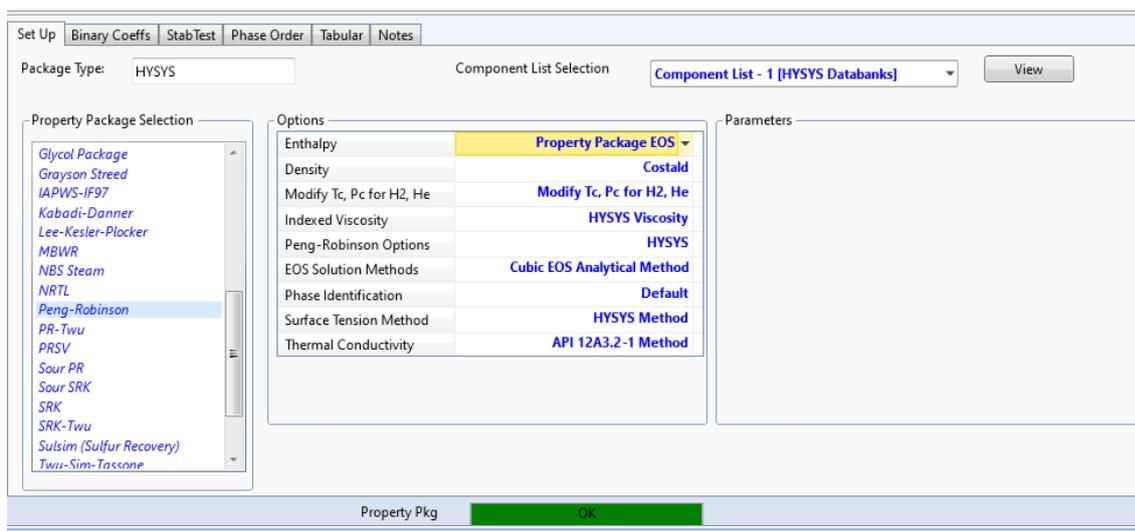


Figure IV.IV : Choix de l'équation thermodynamique.

la sélection du système d'unité

Choisir l'ensemble d'unités. Pour cela, il vous faut sélectionner **format** dans le **menu bar**. Le menu suivant va apparaitre, Et ensuite sélectionnez **eng unit**.

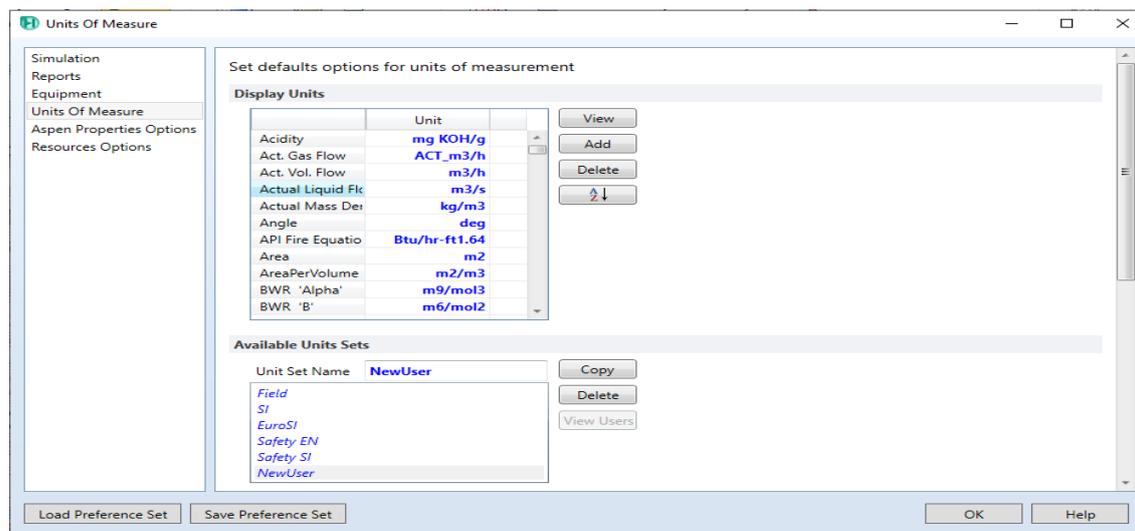


Figure IV.V : Choix du système d'unités.

la création du procédé (Dessiner le flowsheet)

Pour dessiner l'organigramme il faut travailler avec la palette d'organigramme, qui ressemble à ceci :

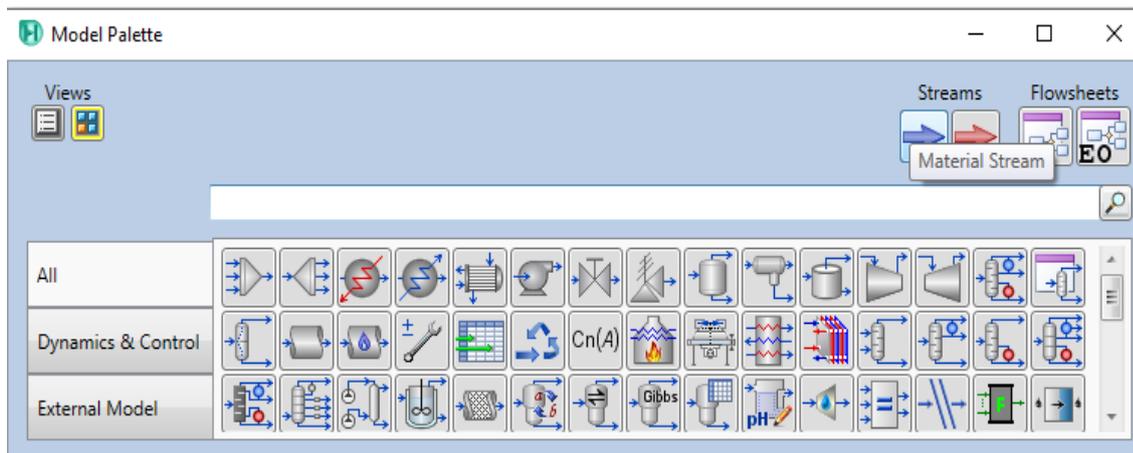


Figure IV.VI : palette d'organigramme.

Choisir les icones nécessaire puis les ajouté au flowsheet.

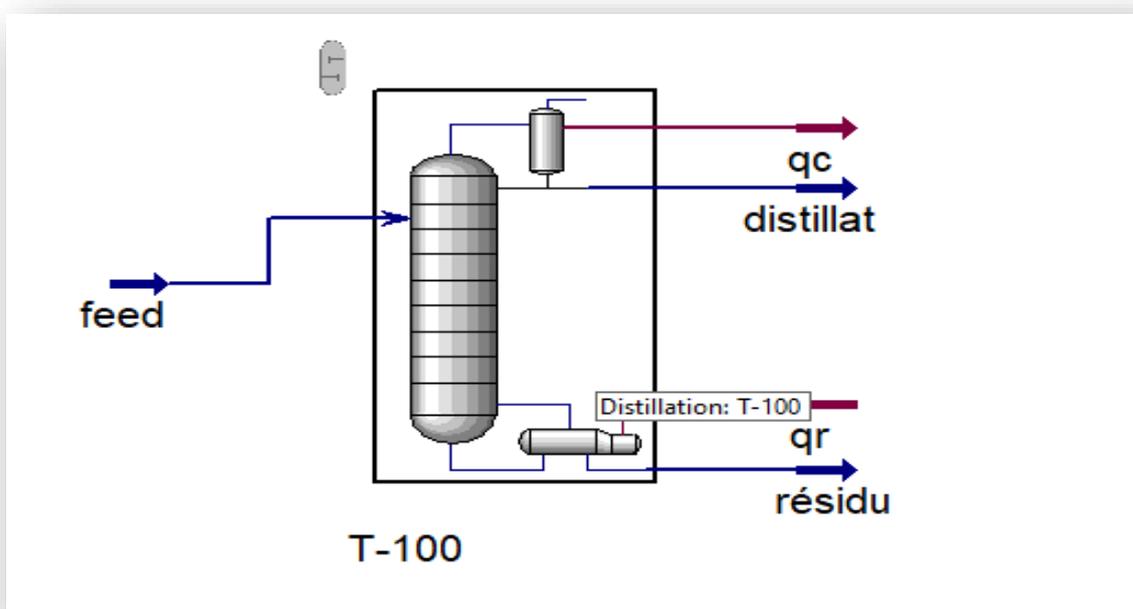


Figure IV.VII : Le flowsheet.

Créer un Flux d'alimentation "Feed" :

Nous sommes maintenant en mesure de définir le stream d'alimentation. Ceci peut être fait en employant la commande des spécifications sur la barre de menu ou par une double clique directement sur le stream. Taper alim, le nom du nouveau flux, dans la case Stream Name, Il reste ensuite à remplir les cases avec les propriétés qu'on connait. Une fois que les cases sont remplis, presser le bouton OK. Le flux est maintenant complètement défini.

Stream Name	Vapour Phase	Liquid Phase
FEED	0,0080	0,9920
Vapour / Phase Fraction	0,0080	0,9920
Temperature [F]	180,8	180,8
Pressure [psia]	120,0	120,0
Molar Flow [lbmole/h]	0,8032	99,20
Mass Flow [kg/h]	2955	2933
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	4,900	3,778e-002
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-1,530e+005	-1,276e+005
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	104,5	157,8
Heat Flow [kJ/h]	-6,940e+006	-4,650e+004
Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h]	4,874	3,753e-002
Fluid Package	Basis-1	
Utility Type		

Figure IV.VIII : Création du flux d'alimentation.

Entrée les paramètres d'équipement

Pour modifier les spécifications de la colonne, double-cliquez sur la tour et un sous-menu apparaîtra.

La première page de l'Input Expert apparaît. Lorsque vous installer une colonne, HYSYS fournit certaines valeurs par défaut qu'il est possible de modifier.

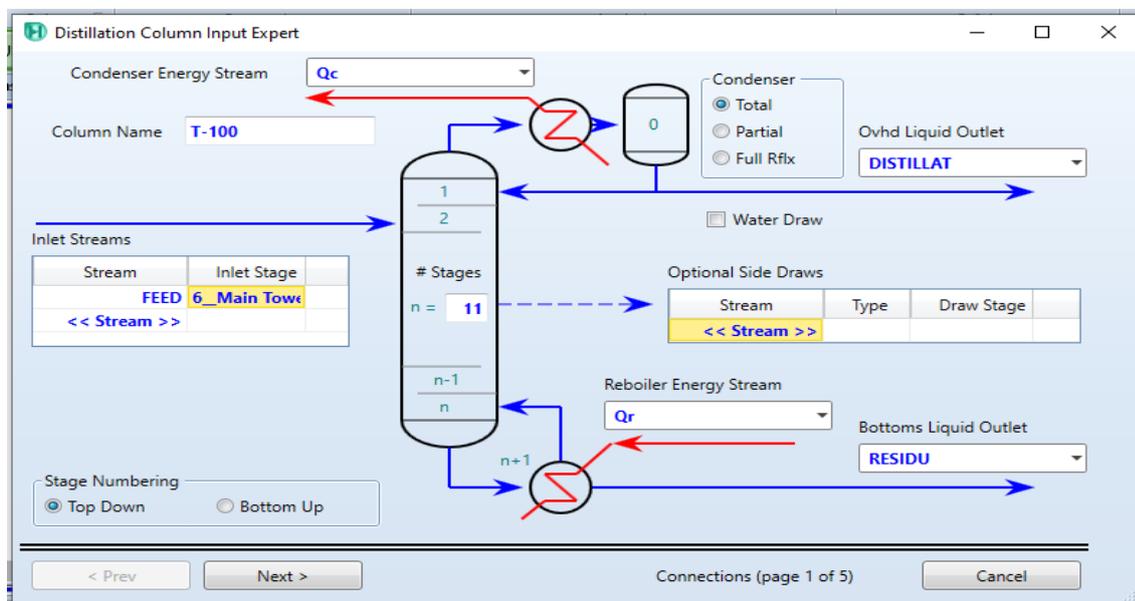


Figure IV.IX : Spécification de la colonne.

Presser le bouton Next pour avancer à la page suivante qui permet de définir le profil de pression. Dans notre cas, le profil de pression est supposé linéaire. Entrer les valeurs suivantes :

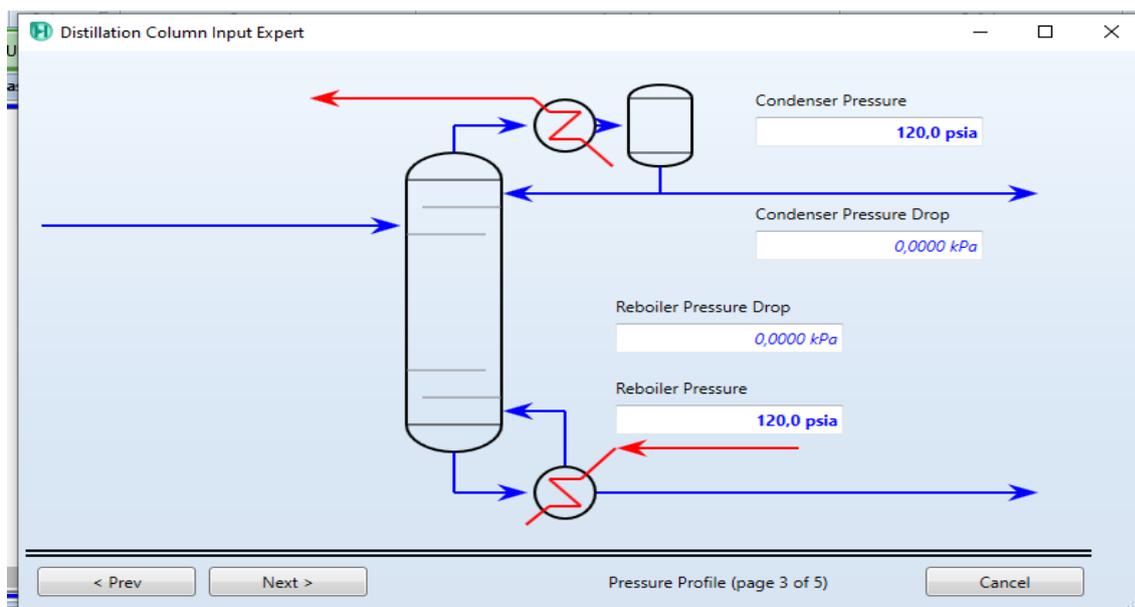


Figure IV.X : Définition du profile de pression.

Presser le bouton Next pour avancer à la page Optional Estimate. Bien que HYSYS ne requiert pas d'estimation pour faire converger la colonne, une bonne estimation permettra d'atteindre la solution plus rapidement.

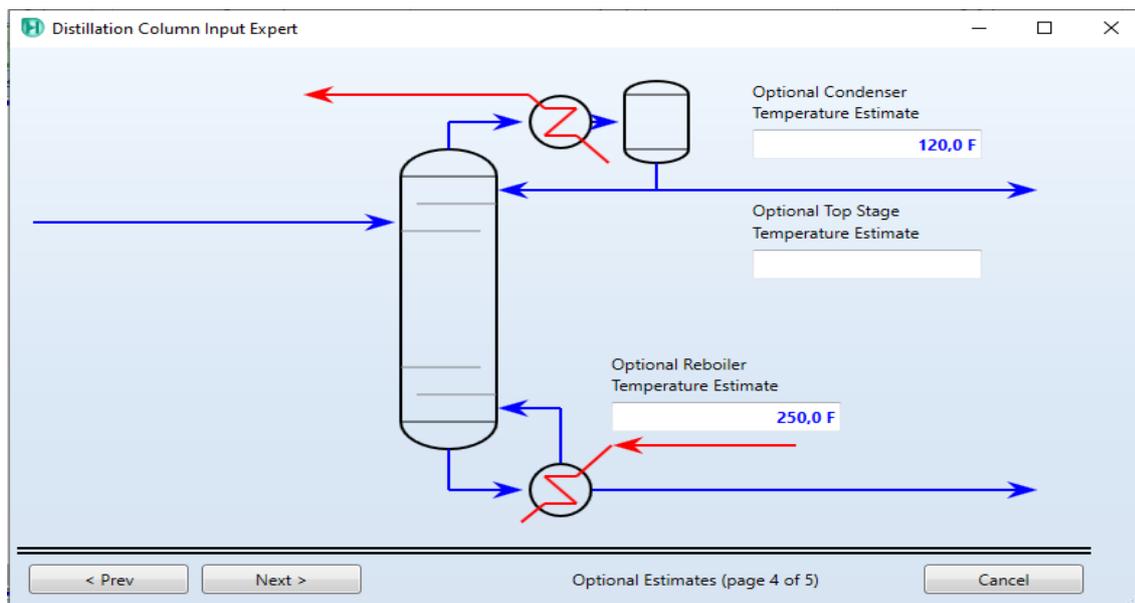


Figure IV.XI : Estimation de la température.

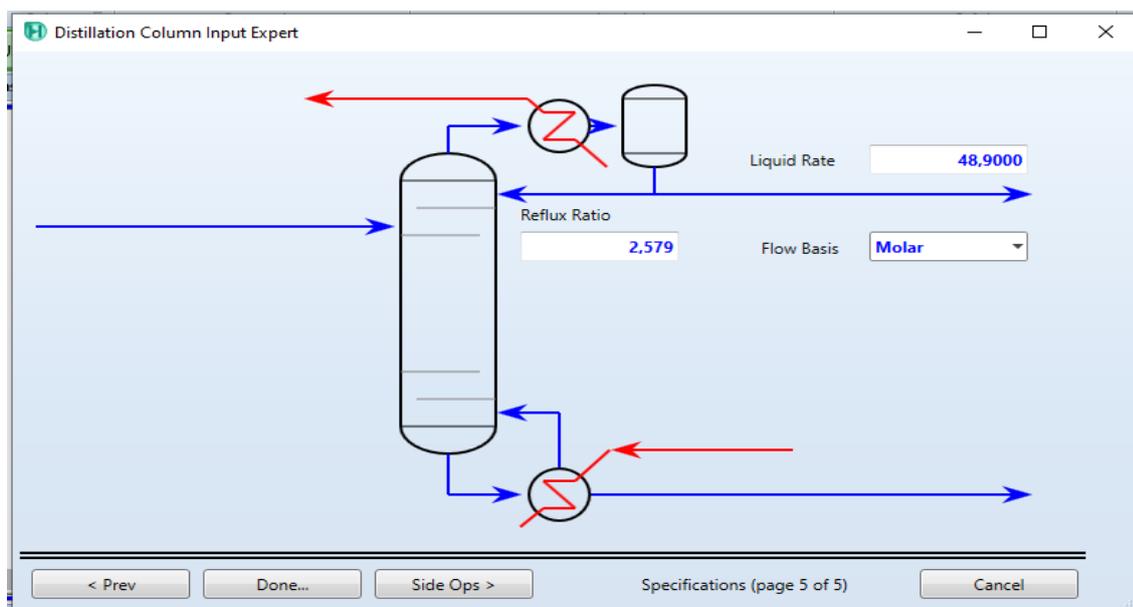


Figure IV.XII : Spécification du distillat et du taux de reflux.

Presser le bouton **Done**.

Cliquer sur l'Active Check Box du taux de reflux pour que ce soit uniquement une approximation et pas une spécification. Le nombre de DDL augmente de 1.

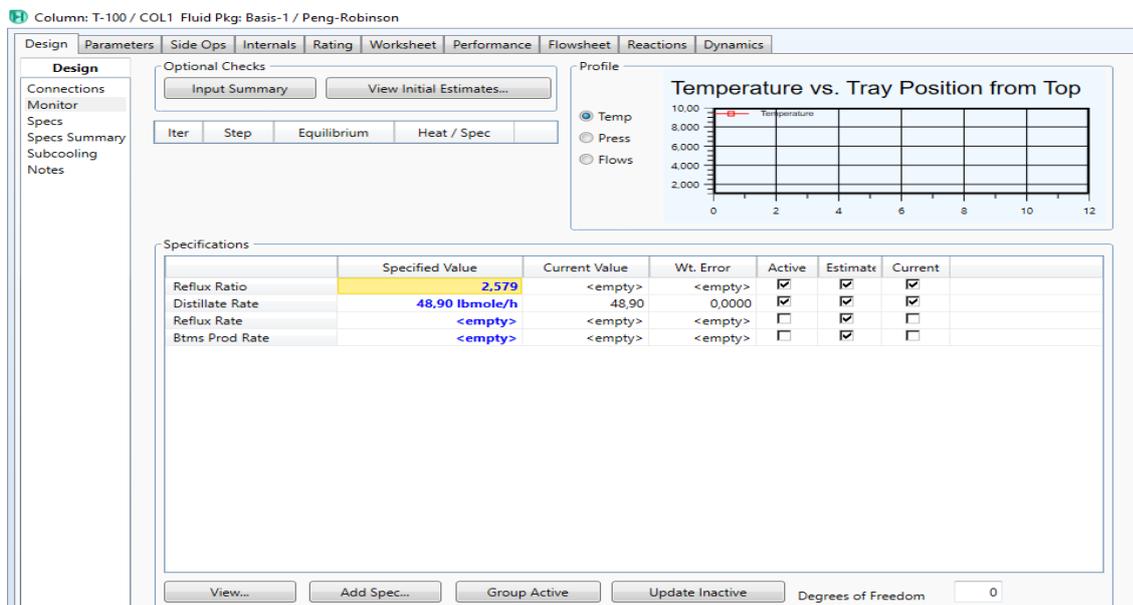


Figure IV.XIII : Espace monitor.

Il faut ensuite ajouter une spécification, pour cela il faut ouvrir la page **Specs**. Se positionner sur column temperatur et presser le bouton **Add Specs**. On veut que la température au condenseur (1_Main TS) soit de 55°C. La nouvelle spécification apparaît dans la liste. Il faut ensuite retourner à la page Monitor.

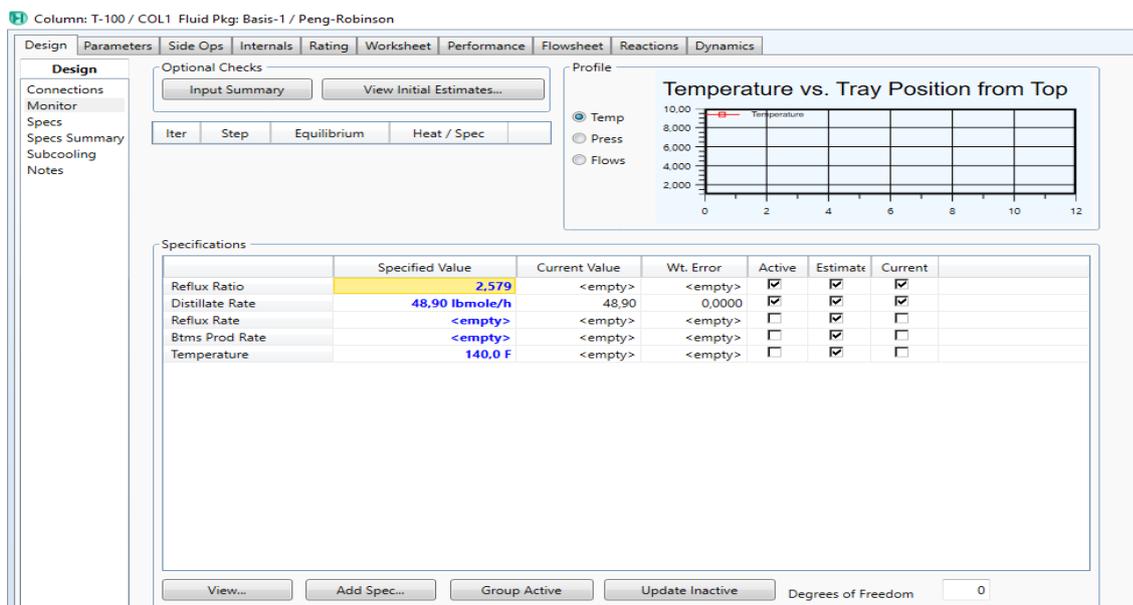


Figure IV.XIV : Introduire d'autres spécifications.

Pour simuler la colonne, il suffit de presser le bouton **Run**. La colonne converge rapidement en quelques itérations. Le profil de température est fournit dans le coin droit de la page.

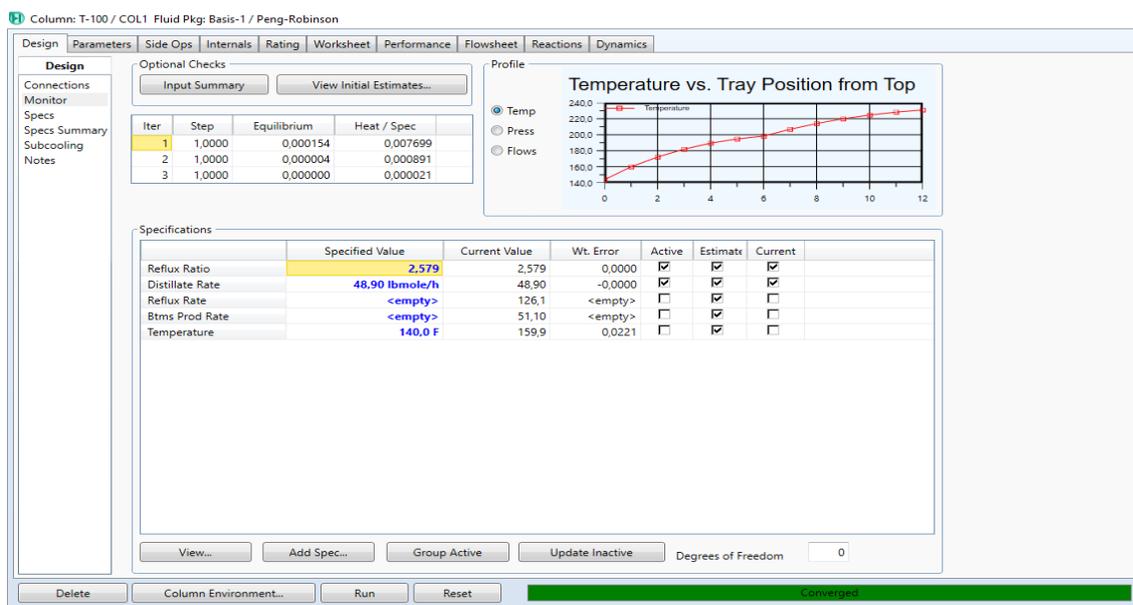


Figure IV.XV : Convergence de la colonne.

IV.10 Résultat de la simulation de la colonne :

IV.10.1 Stream 2 : (distillat) :

Worksheet	Stream Name	distillat	Liquid Phase
Conditions	Vapour / Phase Fraction	0,0000	1,0000
Properties	Temperature [F]	143,8	143,8
Composition	Pressure [psia]	120,0	120,0
Oil & Gas Feed	Molar Flow [lbmole/h]	48,90	48,90
Petroleum Assay	Mass Flow [kg/h]	1293	1293
K Value	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	2,246	2,246
User Variables	Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-1,448e+005	-1,448e+005
Notes	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	92,12	92,12
Cost Parameters	Heat Flow [kJ/h]	-3,211e+006	-3,211e+006
Normalized Yields	Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h]	2,236	2,236
	Fluid Package	Basis-1	
	Utility Type		

Figure IV.XVI : Conditions du distillat.

Worksheet	Stream Name	distillat	Liquid Phase
Conditions	Molecular Weight	58,28	58,28
Properties	Molar Density [kgmole/m3]	8,885	8,885
Composition	Mass Density [kg/m3]	517,8	517,8
Oil & Gas Feed	Act. Volume Flow [m3/h]	2,496	2,496
Petroleum Assay	Mass Enthalpy [kJ/kg]	-2484	-2484
K Value	Mass Entropy [kJ/kg-C]	1,581	1,581
User Variables	Heat Capacity [kJ/kgmole-C]	161,0	161,0
Notes	Mass Heat Capacity [kJ/kg-C]	2,763	2,763
Cost Parameters	LHV Molar Basis (Std) [kJ/kgmole]	2,664e+006	2,664e+006
Normalized Yields	HHV Molar Basis (Std) [kJ/kgmole]	2,869e+006	2,869e+006
	HHV Mass Basis (Std) [kJ/kg]	4,923e+004	4,923e+004
	CO2 Loading	<empty>	<empty>
	CO2 Apparent Mole Conc. [kgmole/m3]	<empty>	<empty>
	CO2 Apparent Wt. Conc. [kamol/ka]	<empty>	<empty>

Property Correlation Controls:

Preference Option: **Active**

Figure IV.XVII : Propriétés du distillat.

IV.10.2 Stream : 3 (résidu) produit de fond :

Worksheet	Stream Name	residu	Liquid Phase
Conditions	Vapour / Phase Fraction	0,0000	1,0000
Properties	Temperature [F]	231,0	231,0
Composition	Pressure [psia]	120,0	120,0
Oil & Gas Feed	Molar Flow [lbmole/h]	51,10	51,10
Petroleum Assay	Mass Flow [kg/h]	1662	1662
K Value	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	2,654	2,654
User Variables	Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-1,588e+005	-1,588e+005
Notes	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	114,1	114,1
Cost Parameters	Heat Flow [kJ/h]	-3,680e+006	-3,680e+006
Normalized Yields	Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h]	2,646	2,646
	Fluid Package	Basis-1	
	Utility Type		

Figure IV.XVIII : Conditions de la simulation pour le résidu.

Worksheet	Stream Name	residu	Liquid Phase
Conditions	Molecular Weight	71,70	71,70
Properties	Molar Density [kgmole/m3]	7,201	7,201
Composition	Mass Density [kg/m3]	516,3	516,3
Oil & Gas Feed	Act. Volume Flow [m3/h]	3,219	3,219
Petroleum Assay	Mass Enthalpy [kJ/kg]	-2214	-2214
K Value	Mass Entropy [kJ/kg-C]	1,592	1,592
User Variables	Heat Capacity [kJ/kgmole-C]	210,1	210,1
Notes	Mass Heat Capacity [kJ/kg-C]	2,931	2,931
Cost Parameters	LHV Molar Basis (Std) [kJ/kgmole]	3,251e+006	3,251e+006
Normalized Yields	HHV Molar Basis (Std) [kJ/kgmole]	3,496e+006	3,496e+006
	HHV Mass Basis (Std) [kJ/kg]	4,876e+004	4,876e+004
	CO2 Loading	<empty>	<empty>
	CO2 Apparent Mole Conc. [kgmole/m3]	<empty>	<empty>
	CO2 Apparent Wt. Conc. [kmol/ka]	<empty>	<empty>

Figure IV.XIX : Propriétés du résidu.

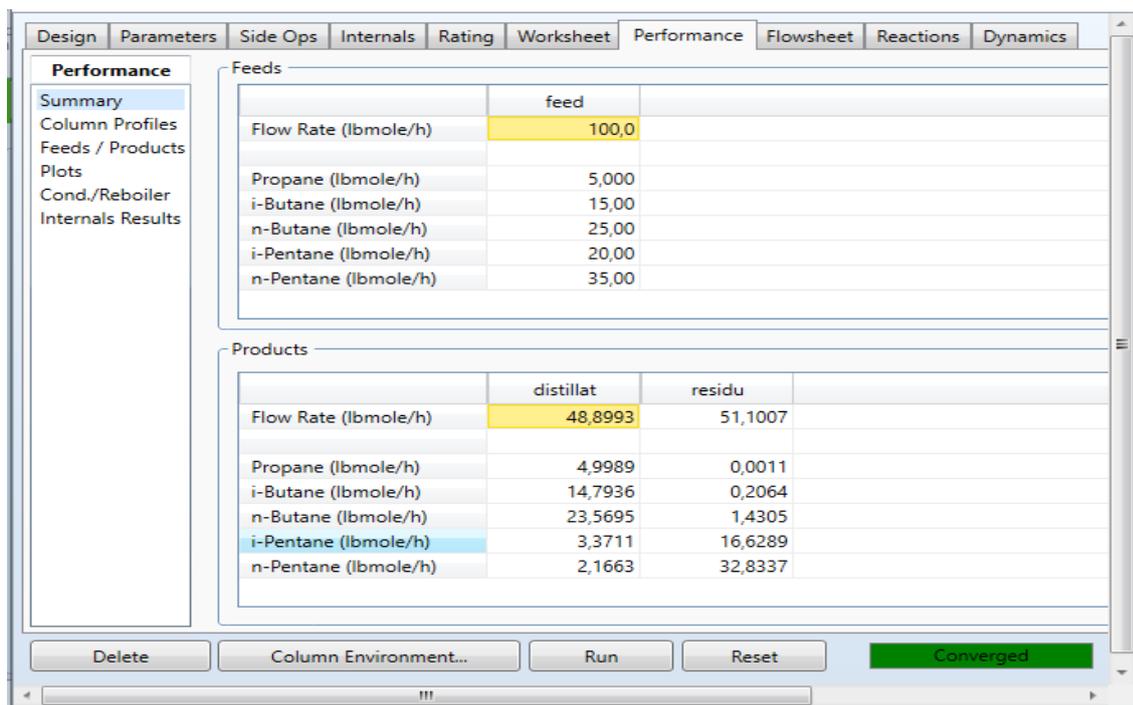


Figure IV.XX : les compositions de différents courants.

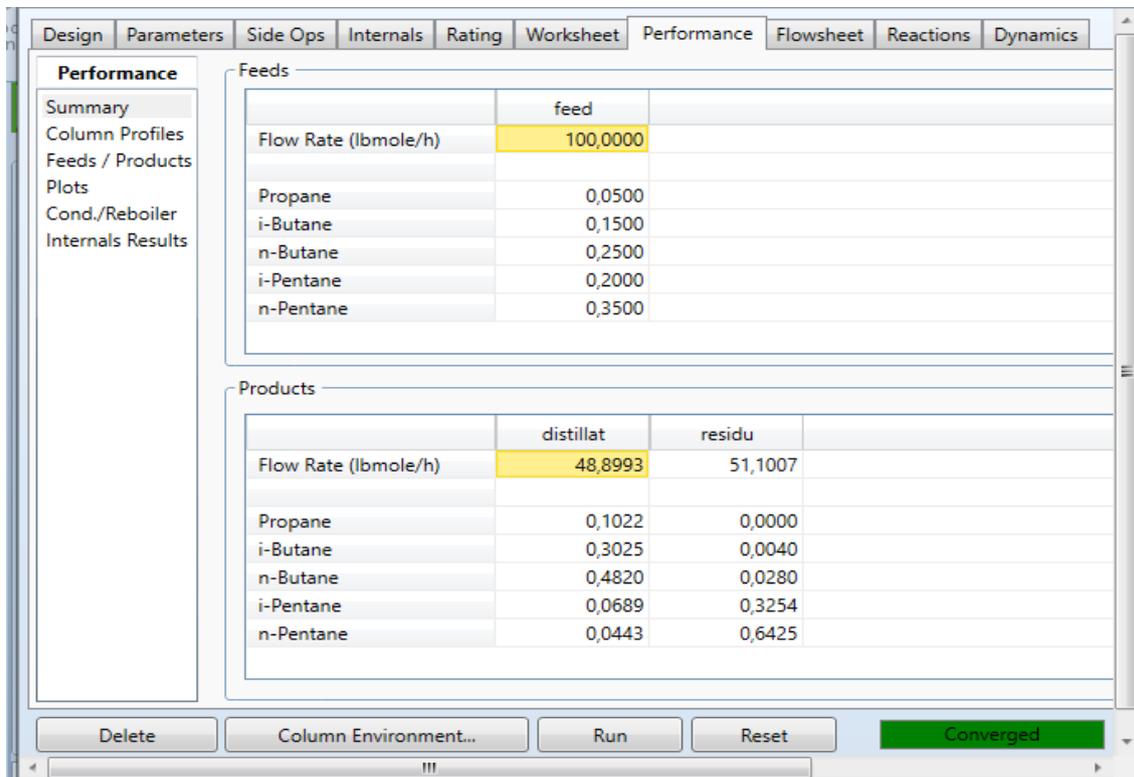


Figure IV.XXI : les compositions de différents courants.

Name	feed @COL1	distillat @COL1	residu @COL1
Vapour	0,0080	0,0000	0,0000
Temperature [F]	180,8	143,8	231,0
Pressure [psia]	120,0	120,0	120,0
Molar Flow [lbmole/h]	100,0	48,90	51,10
Mass Flow [kg/h]	2955	1293	1662
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	4,900	2,246	2,654
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-1,530e+005	-1,448e+005	-1,588e+005
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	104,5	92,12	114,1
Heat Flow [kJ/h]	-6,940e+006	-3,211e+006	-3,680e+006

Tableau IV.I : les conditions de différents courants (worksheet).

		Optional Estimates			
	Stage	Pressure [psia]	Temp [F]	Net Liquid [lbmole/h]	Net Vapour [lbmole/h]
Condenser	0	120,0	120,0	126,1	1,623e-007
1__Main Tower	1	120,0	159,9	122,3	175,0
2__Main Tower	2	120,0	172,1	119,1	171,2
3__Main Tower	3	120,0	182,0	116,9	168,0
4__Main Tower	4	120,0	189,5	115,6	165,8
5__Main Tower	5	120,0	194,8	114,9	164,5
6__Main Tower	6	120,0	198,3	215,1	163,8
7__Main Tower	7	120,0	206,8	216,2	164,0
8__Main Tower	8	120,0	214,1	217,3	165,1
9__Main Tower	9	120,0	220,0	218,4	166,2
10__Main Tower	10	120,0	224,7	219,4	167,3
11__Main Tower	11	120,0	228,3	220,1	168,3
Reboiler	12	120,0	250,0	51,10	169,0

Tableau IV.II : steady state profiles.

Column: T-100 / COL1 Fluid Pkg: Basis-1 / Peng-Robinson

Design Parameters Side Ops Internals Rating Worksheet Performance Flowsheet Reactions Dynamics

Parameters

Profiles
Estimates
Efficiencies
Solver
2/3 Phase
Fluid Pkgs

Composition Estimates

	Propane	i-Butane	n-Butane	i-Pentane	n-Pentane	Sum
Condenser	0,1022	0,3025	0,4820	6,894e-002	4,430e-002	1,000
1__Main To...	4,156e-002	0,2390	0,4814	0,1343	0,1037	1,000
2__Main To...	2,181e-002	0,1814	0,4261	0,1958	0,1750	1,000
3__Main To...	1,560e-002	0,1402	0,3565	0,2414	0,2464	1,000
4__Main To...	1,348e-002	0,1142	0,2962	0,2673	0,3089	1,000
5__Main To...	1,260e-002	9,889e-002	0,2524	0,2767	0,3594	1,000
6__Main To...	1,216e-002	9,021e-002	0,2236	0,2752	0,3988	1,000
7__Main To...	4,674e-003	6,190e-002	0,1845	0,3056	0,4434	1,000
8__Main To...	1,718e-003	4,000e-002	0,1425	0,3289	0,4870	1,000
9__Main To...	6,090e-004	2,452e-002	0,1037	0,3429	0,5282	1,000
10__Main T...	2,089e-004	1,431e-002	7,151e-002	0,3469	0,5671	1,000
11__Main T...	6,910e-005	7,904e-003	4,648e-002	0,3409	0,6047	1,000
Reboiler	2,140e-005	4,039e-003	2,799e-002	0,3254	0,6425	1,000

Tableau IV.III : La composition des constituants sur chaque plateau.

IV.11 Variation des paramétrés dans la colonne

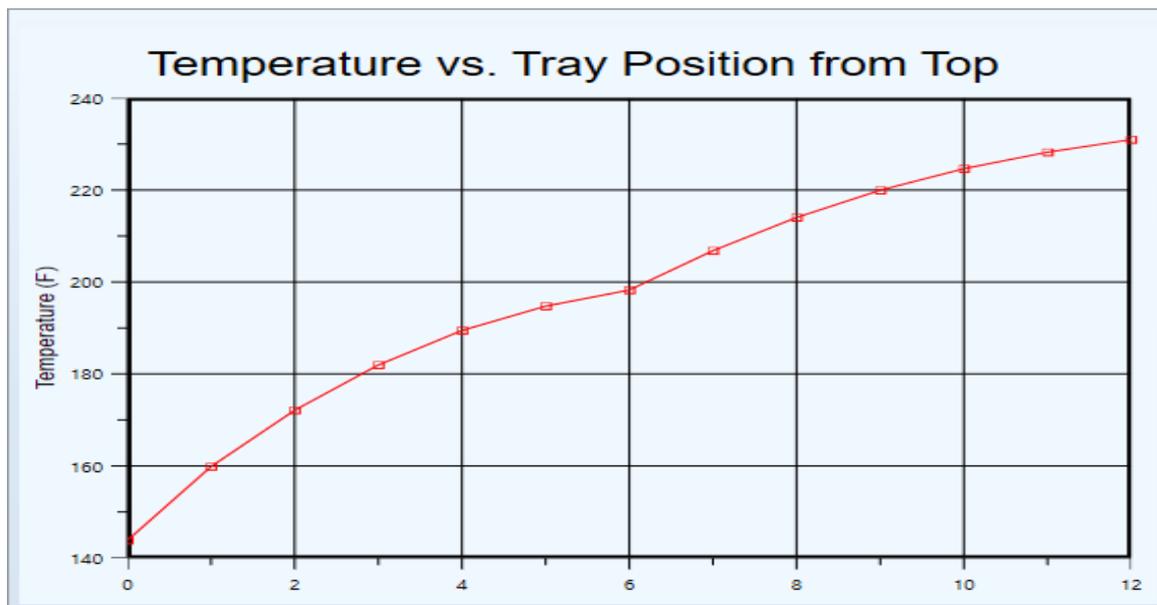


Figure IV.XXII : profile de température en fonction de la position du plateau.

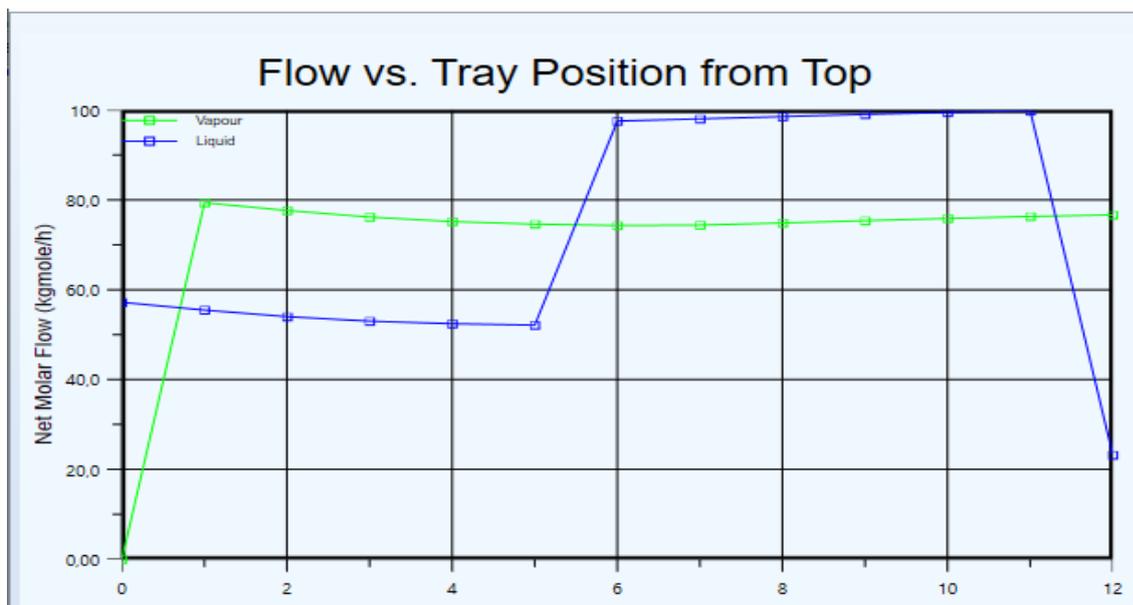


Figure IV.XXIII : Profil de débit molaire en fonction du nombre de plateaux.

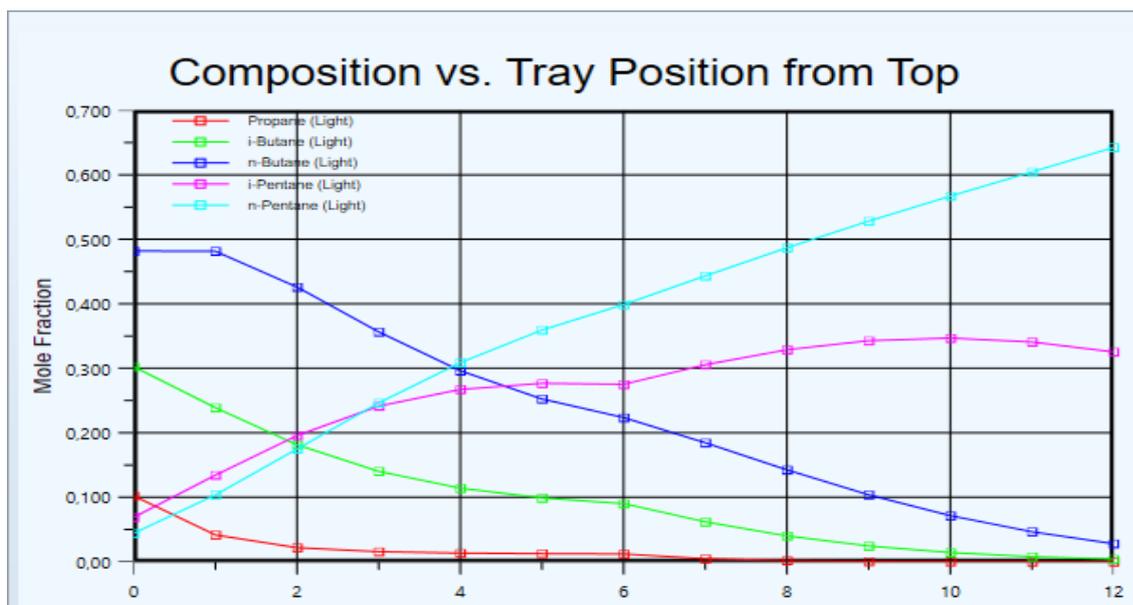


Figure IV.XXIV : la composition molaire des constituants en fonction de la position du plateau.

IV.12 Interprétation des courb Hysys :

Figure IV.XXV : La courbe reflète la température en fonction de la position du plateau.

La température diminue du fond vers le haut, sauf entre le cinquième et le sixième plateau qu'on voit que la température varie légèrement, ceci s'explique par le fait que nous sommes dans la zone d'alimentation et que le transfert de matière ne s'est pas encore intensifié.

Le profil de température dans la colonne de stabilisation présente une évolution normale le long de la colonne, sauf une présence d'un pic qui est remarqué au niveau du plateau d'alimentation (au niveau du 6^{ème}), ce pic s'explique par la différence entre la température d'alimentation et celle du plateau.

La température est maximale au fond de la colonne ce qui est normale par ce que nous sommes dans le domaine de rebouillage, et minimale au sommet de la colonne par ce que nous sommes dans le domaine de condenseur (reflux froid).

Figure IV.XXVI : Profil de débit molaire en fonction du nombre de plateaux

D'après la figure on constate que le débit de vapeur dans la section de rectification est supérieur à celui de liquide mais quand on arrive (au 6^{ème} plateau) le débit de liquide augmente d'une façon considérable par rapport au débit de vapeur qui est diminué à cause de la fraction liquide vapeur de l'alimentation.

Les lignes parallèles expliquent l'équilibre liquide-vapeur dans chaque plateau.

D'après le graphe, le débit vapeur est important par rapport à celui de la phase liquide dans la section d'enrichissement. Le débit liquide augmente brusquement par rapport à celui de la phase vapeur dans la section d'épuisement à cause de l'alimentation qui se trouve à l'état liquide, et ce graphe prouve une stabilité dans le fonctionnement de la colonne.

Figure IV.XXVII : la composition molaire des constituants en fonction de la position du plateau

La courbe reflète la composition molaire des constituants sur chaque plateau. la plus grande concentration du N-butane se trouve localisée au sommet de la colonne (plateau n 1) et la plus faible concentration au fond de la colonne.

L'effet inverse se réalise pour le isobutane autrement dit la plus grande concentration s'y trouve au fond de la colonne.

Les résultats de la courbe montrent qu'une séparation pure du composant a été obtenue.

Le résultat montre également que la composition de propane s'est vaporisée au niveau de l'entrée d'alimentation située sur le plateau 6.

La courbe montre que l'iso-butane et le n-butane se sont vaporisés et séparés au sommet de la colonne sous forme de distillat, laissant l'iso-pentane et le n-pentane comme liquide au fond de la colonne.

IV.13 Résultats et discussion

Il a été constaté qu'il n'y a pas une grande différence entre le modèle PR et celles simulées par CS, les résultats sont presque identiques en ce qui concerne le calcul des débits molaires et massiques ainsi que les compositions, le modèle thermodynamique Peng Robinson donne une meilleure convergence. Les analyses des résultats obtenus par ce modèle nettement en évidence. On constate que le modèle de **Peng Robinson** est le plus adéquat en comparant entre les résultats obtenus lors de la simulation en utilisant le modèle thermodynamique **CS**. Ce modèle montre son efficacité et sa fiabilité pour les mélanges des hydrocarbures à moyenne et haute pression.

La différence a connu une divergence dans la détermination de la charge du rebouilleur et la charge du condenseur. Depuis le chauffage est plus cher que le refroidissement, le principal coût d'exploitation est le coût du vapeur pour chauffer le rebouilleur.

C'est pourquoi il est si important de vérifier votre choix de modèle thermodynamique.

Tous ça est fait en se basant sur une efficacité des plateaux de l'ordre de 1

Conclusion générale

Le calcul de la colonne (l'étude paramétrique) , que nous nous sommes fixés comme objectif, nous a servi, dans notre travail, de support pour traiter un problème de distillation de mélanges complexes. A cet effet, nous avons été amenés à étudier et appliquer la méthode dite de Fenske-Underwood-Gilliland (F.U.G). il permet de calculer les bilans et les composition molaires et massiques des différents produits entrant et sortant de la colonne, le taux de reflux minimum et le taux de reflux optimal ainsi que le nombre d'étages minimum et d'étages nécessaires à effectuer la séparation, il permet aussi de localiser l'étage d'alimentation en calculant le nombre d'étages de la section concentration et celui de la section épuisement.

Le simulateur Aspen Hysys utilise l'équation PR, qui est modifiée suivant les règles de mélange', valables pour des systèmes complexes comme le pétrole brut et leurs coupes. Généralement, plus la base théorique d'une corrélation est solide, plus elle en résulte fiable.

En particulier, cette corrélation a été largement prouvée et leurs résultats ont été comparés à ceux obtenus dans des cas réels du procédé de distillation primaire du pétrole brut.

Le simulateur le compense avec leur large base de données brute du monde entier. Son application doit être évitée en dehors de sa plage valide. Aspen Tutorial recommande l'utilisation du modèle CS car son application est fiable grâce à leur large source d'informations.

Le modèle Chao-Sea Bien que la base théorique ne soit pas solide, cette simulateur le compense avec leur large base de données brute du monde entier. Son application doit être évitée en dehors de sa plage valide. Aspen Tutorial recommande l'utilisation du modèle CS car son application est fiable grâce à leur large source d'informations.

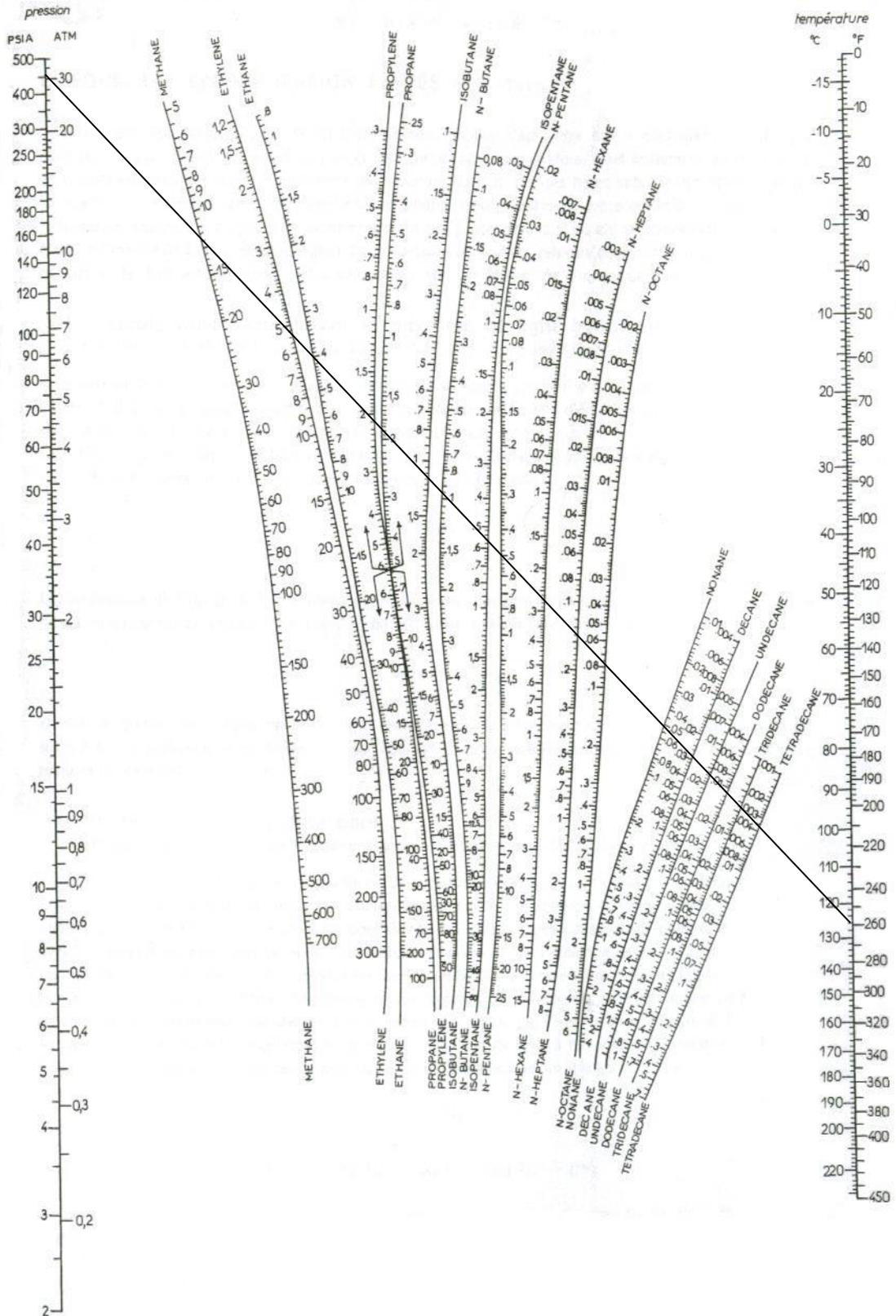
Bibliographie

- [1] <https://www.copper-alembic.com/fr/page/histoire-de-la-distillation-des-boissons-alcoolisees>
- [2] S.Belazreg, « Etude de section de débutanisation du complexe GNL1/Z», Mémoire de l'IAP, (2012). [3] P. Wuithier, « Raffinage et génie chimique», Tome1 ; Edit.Technip : Paris, (1972).
- [4] CICILE, « Distillation –Absorption », technique de l'ingénieur, J-2610, J-2611, J-2621 J-2622 J-2623, Edition Tech
- [5] M. Lakhdar Aggoune, « Détection de défauts dans les procédés industriels par l'utilisation Des méthodes d'identification paramétrique », Thèse de doctorat, université de Stif, (2015).
- [6] G.Ardit, « Technologie chimique industrielle », Edition Eyrolles, paris, (1972).
- [7] G.janusz, « Distillation et rectification », Edition OPU. (1984).
- [8] F. Busson. Les Bond Graphs multi énergie pour la modélisation et surveillance en génie des procédés. France, 2002.
- [9] H.Perry, W.Gereen, «Perry Chemical Engineer »Handbook, 7ème Edition, McGraw Hill, New York, (1994).
- [10] AKEDI MOUNIR MOUHSEN. MOSTEFA HOUSSEMEDDINE, Mémoire, CONTRIBUTION À L'ÉTUDE D'UNE COLONNE DE DISTILLATION À PLATEAUX : (Dé-butaniseur C-102 de Hassi R'MEL) , UNIVERSITE M'HAMED BOUGARA-BOUMERDES.
- [11] Jean-Pierre Wauquier, Raffinage du Pétrole, tome2-Procédés de séparation.Edition TECHNIP, (1998)
- [12] P.Tambouze « raffinage du pétrole "Matériels et équipement" »Tome 4.
- [13] Ronald W. Rousseau « handbook of separation process technology »1987.
- [14] AIDE Mémoire Emilian Kaller (Génie chimique).
- [15] Melle MOHAMED SEGHIR Zahira . Mémoire présenté en vue de l'obtention du DIPLOME DE MAGISTER. Calcul technologique et simulation du procédé de rectification des gaz (Arzew). Université Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem.
- [16] Henry Z.Kister . « distillation DESIGN ». Engineering Advisor Brown & Root Sraun, Alhambra, California.
- [17] J. D. Seader SEPARATION PROCESS PRINCIPLES Chemical and Biochemical Operations, THIRD EDITION.
- [18] Bernard Grandjean, cour DISTILLATION & EXTRACTION Volume 1,2013.

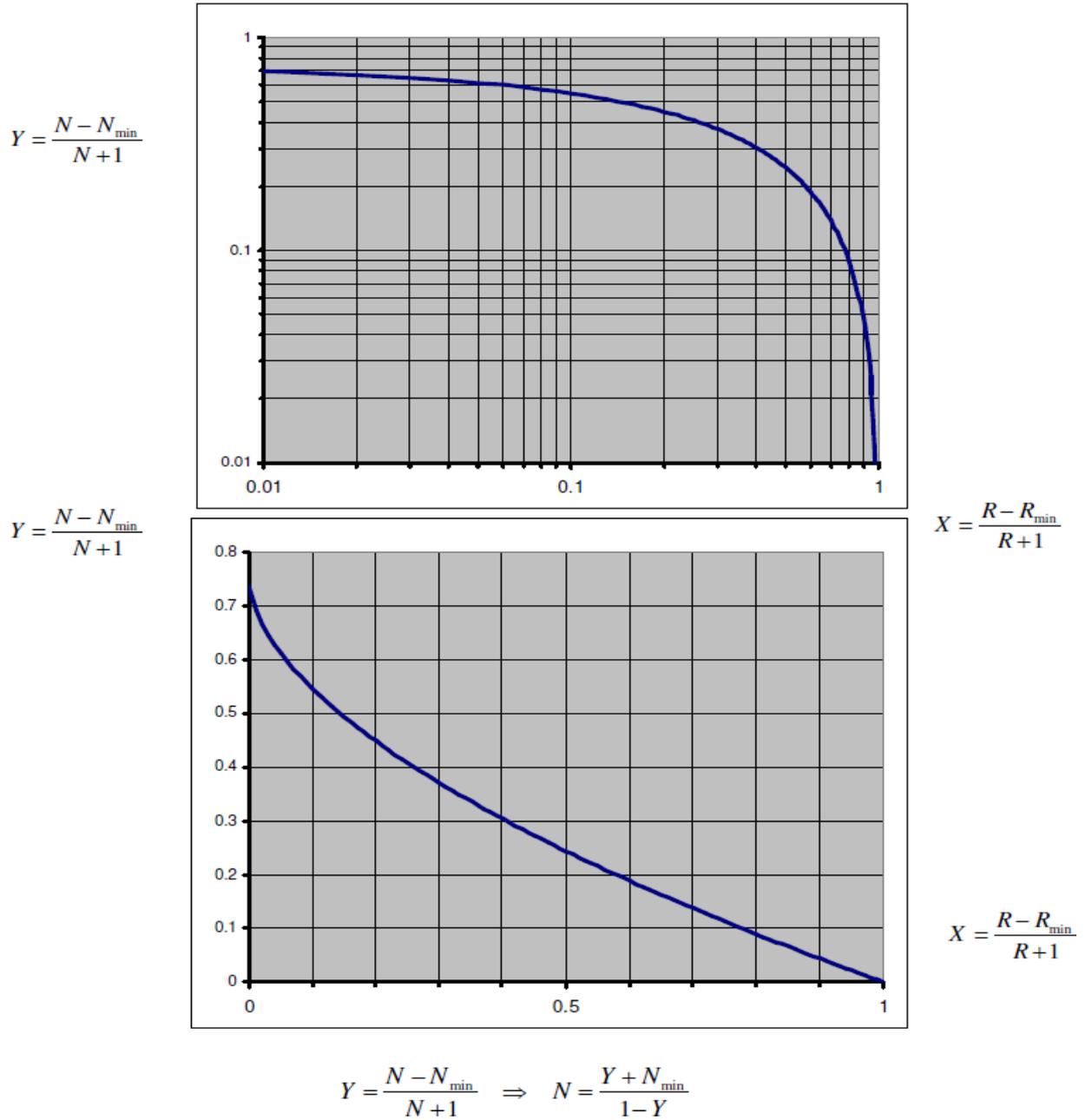
- [19]. Coulson & Richardson's. Chemical Engineering, Volume 6, Fourth edition Chemical Engineering Design R. K. Sinnott
- [20] MOUNI Nasserredine . Mémoire de Magister. Simulation et optimisation des paramètres technologiques de l'unité de fractionnement des GPL à Haoud Berkaoui. UNIVERSITE M'HAMED BOUGARA-BOUMERDES.
- [21] M.S. Ray, Distillation (1980-1990): A Bibliography, Separation Science and Technology, Vol. 27, 1, (1992), pp. 105-128.
- [22] J.C. Wang and Y.L. Wang, A Review on the Modeling and simulation of Multistage separation Processes, Proceeding of The International Conference Foundation of computer Aided Chemical Process design, (July 1980), pp. 121-170.
- [23]. C.D. Holland, History of the Development of Distillation Computer Models, A.I.Ch.E Symposium Series, Vol. 79, 235, (1983), pp. 15-38.
- [24]. C.J. King, Separation Processes, McGraw-Hill Edition, New York (1980).
- [25] J.B. Riggs, An Introduction to Numerical Methods for Chemical Engineers, Texas Tech University Press, second edition, (1994).
- [26] W.H. Press, B.P. Flanery, S.A. Teukolsky, and W.T. Vetterling, Numerical Recipes, Cambridge Press, U.K. (1986).
- [27] L.M. Naphtali and D.P. Sandholm, Multicomponent Separation Calculations by Linearization, A.I.Ch.En Journal, Vol. 17, 1, (January 1971), pp. 148-153.
- [28] R.P. Goldstein and R.B. Stanfield, Flexible Method for the Solution of Distillation Design Problems Using the Newton-Raphson Technique, Industrial and Engineering Chemistry Process design and development Journal, Vol. 09, 1, (January 1970), pp. 78-84.
- [29] G.S Eugene, Solution Procedures for Nonideal Equilibrium Stage Processes at Steady State And Unsteady State Described By Algebraic Or Differential Algebraic Equations Ph.D dissertation, Texas A&M University, USA, (1979).
- [30] mémoire de fin d'étude « simulation d'une unité de production de méthanol à l'aide de l'aspen plus-hysys » réalisé par : Djebbari, A Université Mohamed Khider – Biskra (2014)
- [31] Pierre Rouchon « simulation dynamique et commande non linéaire des colonnes à distiller » thèse de doctorat, 1990.

- [32] Jiménez, M.S.Basualdo, Et J.C.Gómez « nonlinear dynamic modeling of multicomponent batch distillation: a case study » brazilian journal of chemical engineering, vol. 19, no. 03, pp. 307 - 317, july - september 2002
- [33] Melle MOHAMED SEGHIR Zahira . Mémoire présenté en vue de l'obtention du DIPLOME DE MAGISTER. Calcul technologique et simulation du procédé de rectification des gaz (Arzew). Université Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem.
- [32] cours initiation au simulateur HYSYS, présenté par N. Rebai. Institut Algerien du petrole
- [33] mémoire de fin d'étude « simulation d'une unité de production de méthanol à l'aide de l'aspen plus-hysys » réalisé par : Djebbari,A Université Mohamed Khider – Biskra (2014)
- [34]. P. Pierre, A to Z of Thermodynamics, Edition Press University of Oxford, (1998).
- [35] Rey G. Montemayor « distillation and vapor pressure measurement in petroleum products » West Conshohocken, PA 19428–29592008
- [36] Baptiste Bouillot. COURS introduction aux méthodes thermodynamique pour le genie des procedes
- [37] TOUAT Oussama et BELAIDI Fares. Projet de Fin d'Etude Master. Analyse énergétique et exergetique d'une centrale à gaz. Université de Bouira.
- [38]. Aspen COMThermo, Reference guide ASPEN Technology, edition (2007), pp. 3-191 3-193.
- [39]. Juan Pablo Gutierrez et al. Int. Journal of Engineering Research and Applications www.ijera.com ISSN: 2248-9622, Vol. 4, Issue 4 (Version 1), April 2014, pp.190-194
- [40]. León Cohen, Diseño y simulación de procesos químicos, (León Cohen Mesonero, 2da Edición Ampliada y modificada. España, 2003).

Annexe



Annexe : Nomogramme des coefficients d'équilibre des hydrocarbures(Scheibel et Jenny) [7].



Annexe : Diagramme de Guililand (Nombre de plateau théorique N en fonction de taux de reflux rf Dans la distillation des mélanges complexes) [12].

Le package thermodynamique Chao-Sea (CS)

Material Stream: distillat

Worksheet Attachments Dynamics

Worksheet	Stream Name	distillat	Liquid Phase
Conditions	Vapour / Phase Fraction	0,0000	1,0000
Properties	Temperature [F]	146,8	146,8
Composition	Pressure [psia]	120,0	120,0
Oil & Gas Feed	Molar Flow [lbmole/h]	48,90	48,90
Petroleum Assay	Mass Flow [kg/h]	1292	1292
K Value	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	2,245	2,245
User Variables	Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-1,445e+005	-1,445e+005
Notes	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	92,78	92,78
Cost Parameters	Heat Flow [kJ/h]	-3,204e+006	-3,204e+006
Normalized Yields	Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h]	2,235	2,235
	Fluid Package	Basis-1	
	Utility Type		

OK

Delete Define from Stream... View Assay

Conditions du distillat.

Material Stream: distillat

Worksheet Attachments Dynamics

Worksheet	Stream Name	distillat	Liquid Phase
Conditions	Molecular Weight	58,24	58,24
Properties	Molar Density [kgmole/m3]	8,847	8,847
Composition	Mass Density [kg/m3]	515,3	515,3
Oil & Gas Feed	Act. Volume Flow [m3/h]	2,507	2,507
Petroleum Assay	Mass Enthalpy [kJ/kg]	-2481	-2481
K Value	Mass Entropy [kJ/kg-C]	1,593	1,593
User Variables	Heat Capacity [kJ/kgmole-C]	156,7	156,7
Notes	Mass Heat Capacity [kJ/kg-C]	2,690	2,690
Cost Parameters	LHV Molar Basis (Std) [kJ/kgmole]	2,662e+006	2,662e+006
Normalized Yields	HHV Molar Basis (Std) [kJ/kgmole]	2,867e+006	2,867e+006
	HHV Mass Basis (Std) [kJ/kg]	4,923e+004	4,923e+004
	CO2 Loading	<empty>	<empty>
	CO2 Apparent Mole Conc. [kgmole/m3]	<empty>	<empty>
	CO2 Apparent Wt. Conc. [kgmol/ka]	<empty>	<empty>

Property Correlation Controls

Property Correlation Controls icons: +, -, up, down, left, right, X, copy, paste, undo, redo

Propriétés du distillat.

Material Stream: résidu

Worksheet Attachments Dynamics

Worksheet	Stream Name	résidu	Liquid Phase
Conditions	Vapour / Phase Fraction	0,0000	1,0000
Properties	Temperature [F]	233,5	233,5
Composition	Pressure [psia]	120,0	120,0
Oil & Gas Feed	Molar Flow [lbmole/h]	51,10	51,10
Petroleum Assay	Mass Flow [kg/h]	1663	1663
K Value	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	2,655	2,655
User Variables	Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-1,586e+005	-1,586e+005
Notes	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	114,8	114,8
Cost Parameters	Heat Flow [kJ/h]	-3,676e+006	-3,676e+006
Normalized Yields	Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h]	2,647	2,647
	Fluid Package	Basis-1	
	Utility Type		

OK

Delete Define from Stream... View Assay

Conditions de la simulation pour le résidu.

Material Stream: résidu

Worksheet Attachments Dynamics

Worksheet	Stream Name	résidu	Liquid Phase
Conditions	Molecular Weight	71,74	71,74
Properties	Molar Density [kgmole/m3]	7,171	7,171
Composition	Mass Density [kg/m3]	514,4	514,4
Oil & Gas Feed	Act. Volume Flow [m3/h]	3,232	3,232
Petroleum Assay	Mass Enthalpy [kJ/kg]	-2211	-2211
K Value	Mass Entropy [kJ/kg-C]	1,601	1,601
User Variables	Heat Capacity [kJ/kgmole-C]	202,8	202,8
Notes	Mass Heat Capacity [kJ/kg-C]	2,827	2,827
Cost Parameters	LHV Molar Basis (Std) [kJ/kgmole]	3,253e+006	3,253e+006
Normalized Yields	HHV Molar Basis (Std) [kJ/kgmole]	3,498e+006	3,498e+006
	HHV Mass Basis (Std) [kJ/kg]	4,876e+004	4,876e+004
	CO2 Loading	<empty>	<empty>
	CO2 Apparent Mole Conc. [kgmole/m3]	<empty>	<empty>
	CO2 Apparent Wt. Conc. [kamol/ka]	<empty>	<empty>

Property Correlation Controls

Property Correlation Controls icons: [Copy] [Paste] [Delete] [Undo] [Redo] [Print] [Refresh] [Help]

Propriétés du résidu.

Performance			
Summary			
Column Profiles			
Feeds / Products			
Plots			
Cond./Reboiler			
Internals Results			
Feeds			
	feed		
Flow Rate (lbmole/h)	100,0		
Propane (lbmole/h)	5,000		
i-Butane (lbmole/h)	15,00		
n-Butane (lbmole/h)	25,00		
i-Pentane (lbmole/h)	20,00		
n-Pentane (lbmole/h)	35,00		
Products			
	distillat	résidu	
Flow Rate (lbmole/h)	48,8990	51,1010	
Propane (lbmole/h)	4,9993	0,0007	
i-Butane (lbmole/h)	14,8019	0,1981	
n-Butane (lbmole/h)	23,6896	1,3104	
i-Pentane (lbmole/h)	3,3082	16,6918	
n-Pentane (lbmole/h)	2,1002	32,8998	
Delete			
Column Environment...			
Run			
Reset			
Converged			

Les compositions de différents courants.

Performance			
Summary			
Column Profiles			
Feeds / Products			
Plots			
Cond./Reboiler			
Internals Results			
Feeds			
	feed		
Flow Rate (lbmole/h)	100,0000		
Propane	0,0500		
i-Butane	0,1500		
n-Butane	0,2500		
i-Pentane	0,2000		
n-Pentane	0,3500		
Products			
	distillat	résidu	
Flow Rate (lbmole/h)	48,8990	51,1010	
Propane	0,1022	0,0000	
i-Butane	0,3027	0,0039	
n-Butane	0,4845	0,0256	
i-Pentane	0,0677	0,3266	
n-Pentane	0,0429	0,6438	
Delete			
Column Environment...			
Run			
Reset			
Converged			

les compositions de différents courants.

Name	feed @COL1	distillat @COL1	résidu @COL1
Vapour	0,0000	0,0000	0,0000
Temperature [F]	180,8	146,8	233,5
Pressure [psia]	120,0	120,0	120,0
Molar Flow [lbmole/h]	100,0	48,90	51,10
Mass Flow [kg/h]	2955	1292	1663
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	4,900	2,245	2,655
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-1,532e+005	-1,445e+005	-1,586e+005
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	104,2	92,78	114,8
Heat Flow [kJ/h]	-6,947e+006	-3,204e+006	-3,676e+006

Les conditions de différents courants (worksheet).

		Optional Estimates			
	Stage	Pressure [psia]	Temp [F]	Net Liquid [lbmole/h]	Net Vapour [lbmole/h]
Condenser	0	120,0	120,0	126,1	1,570e-007
1__Main Tower	1	120,0	162,5	122,5	175,0
2__Main Tower	2	120,0	174,4	119,2	171,4
3__Main Tower	3	120,0	184,1	116,9	168,1
4__Main Tower	4	120,0	191,6	115,6	165,8
5__Main Tower	5	120,0	197,0	114,9	164,5
6__Main Tower	6	120,0	200,6	217,0	163,8
7__Main Tower	7	120,0	209,3	218,2	165,9
8__Main Tower	8	120,0	216,6	219,4	167,1
9__Main Tower	9	120,0	222,6	220,6	168,3
10__Main Tower	10	120,0	227,3	221,8	169,5
11__Main Tower	11	120,0	230,9	222,7	170,7
Reboiler	12	120,0	250,0	51,10	171,6

steady state profiles.

Column: T-100 / COL1 Fluid Pkg: Basis-1 / Chao Seader

Design Parameters Side Ops Internals Rating Worksheet Performance Flowsheet Reactions Dynamics

Parameters

Profiles
Estimates
Efficiencies
Solver
2/3 Phase
Fluid Pkgs

Composition Estimates

	Propane	i-Butane	n-Butane	i-Pentane	n-Pentane	Sum
Condenser	0,1022	0,3027	0,4845	6,765e-002	4,295e-002	1,000
1__Main To...	4,092e-002	0,2413	0,4862	0,1311	0,1004	1,000
2__Main To...	2,123e-002	0,1846	0,4320	0,1917	0,1704	1,000
3__Main To...	1,509e-002	0,1432	0,3620	0,2378	0,2419	1,000
4__Main To...	1,299e-002	0,1165	0,3002	0,2650	0,3054	1,000
5__Main To...	1,209e-002	0,1005	0,2546	0,2756	0,3572	1,000
6__Main To...	1,163e-002	9,126e-002	0,2243	0,2750	0,3978	1,000
7__Main To...	4,272e-003	6,248e-002	0,1836	0,3061	0,4436	1,000
8__Main To...	1,492e-003	4,014e-002	0,1401	0,3300	0,4883	1,000
9__Main To...	4,998e-004	2,439e-002	0,1005	0,3444	0,5303	1,000
10__Main T...	1,614e-004	1,407e-002	6,805e-002	0,3483	0,5694	1,000
11__Main T...	5,015e-005	7,680e-003	4,341e-002	0,3422	0,6067	1,000
Reboiler	1,459e-005	3,877e-003	2,564e-002	0,3266	0,6438	1,000

La composition des constituants sur chaque plateau.

