

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'enseignement Supérieur et de la Recherche scientifique



Université Mohamed Khider Biskra

Faculté des Sciences et de la Technologie
Département de Chimie industrielle
Spécialité: Génie des procédés
Option : Génie Chimique

Mémoire de Fin d'Etudes en vue de l'obtention du
diplôme de Master

Thème

*Simulation thermodynamique du
mélange eau/Glycol*

Présenté par :

Mahdi Walid & Hadji Walid

Président : LIAIDI Djemoui

Examineur : MERZOUGUI Abdelkrim

Encadreur : MC. HASSEINE Abdelmalek

Promotion : Juin 2012

Dédicace

Je dédie ce mémoire

A mon cher père

A ma chère mère

A toute ma famille

A tous mes amis

A tous mes enseignants

Sans oublier les étudiants de ma promotions

A tous ceux que j'aime et qui m'aiment.

M.walid

Dédicace

Je dédie ce mémoire

A mon cher père

A ma chère mère

A toute ma famille

A tous mes amis

A tous les étudiants de ma promotion

Sans oublier tous mes enseignants

A tous ceux que j'aime et qui m'aiment.

H.Walid

Remerciements

Tout d'abord, nous tenons à remercier le bon dieu qui nous a aidés à réaliser ce travail.

Nous tenons à remercier notre encadreur MC. HASSEINE Abdelmalek, pour le choix de sujet avoir dirigé ce travail, pour ses conseils et ses encouragements.

Nos vifs remerciements s'adressent aussi aux membres de jury M.r LIAIDI Djemoui, et Mr. MERZOUGUI Abdelkrim nos enseignants à la graduation, pour accepter de juger ce modeste travail.

A la fin nous tenons à remercier toutes personnes qui nous aidés de près ou de loin à réaliser ce travail sans oublier les étudiants de notre promotion.

TITRE : Simulation thermodynamique du mélange Eau/Glycol

Résumé

Ce travail porte sur l'étude expérimentale de la simulation thermodynamique du mélange Eau /Glycol.

L'objectif spécifique de ce travail consiste à l'étude de la déshydratation du gaz et les processus impliqués. La déshydratation est un processus important dans le traitement de gaz. Le gaz est déshydraté pour éviter les dangers associés au transport dans le pipeline et le traitement de gaz humide, les problèmes consistent en la corrosion, condensation de l'eau, la formation de la glace ou des hydrates de gaz.

La Simulation thermodynamique de la déshydratation de gaz est difficile en raison de l'interaction entre l'eau et le Glycol. L'interaction entre l'Eau et le Glycol provient du comportement non idéal de ce mélange. Il est impossible de simuler cette interaction avec les équations d'état thermodynamiques normalement utilisés comme Peng-Robinson.

Pour réaliser la simulation du mélange Eau/Glycol on a utilisé un programme écrit en langage MATLAB. Le processus de déshydratation a également été simulé par le biais du simulateur HYSYS en utilisant son module de thermodynamique avec l'équation d'état de Peng-Robinson. En conclusion on peut dire que le module de thermodynamique du simulateur HYSYS est capable de simuler le processus de déshydratation.

Mots-Clés : Déshydratation, Glycol, MATLAB, HYSYS, Peng-Robinson, équations d'état, Simulation.

TITLE : Thermodynamic Simulation of Water/Glycol mixture

Abstract

This work focuses on the experimental study of thermodynamic simulation of Water /Glycol mixture.

The specific objective of this work is the study of the dehydration of gas and the processes involved. Dehydration is an important process in the treatment of gas. Gas is dehydrated to avoid hazards associated with transport in the pipeline and the treatment of wet gas, problems include corrosion, condensation of the water, the formation of ice or gas hydrates.

The thermodynamic Simulation of gas dehydration is difficult due to the interaction between water and Glycol. The interaction between water and Glycol comes from the non-ideal behavior of this mixture. It is impossible to simulate this interaction with normally used thermodynamic equations of State as Peng-Robinson equations.

A program written in the MATLAB language was used for the simulation of the Water/Glycol mixture. The dehydration process was also simulated in the simulator HYSYS using its thermodynamic module with the equation of State of Peng-Robinson. In conclusion we can say that thermodynamic module of the Simulator HYSYS is capable of simulating the process of dehydration.

Keywords : Dehydration, Glycol, MATLAB, HYSYS, Peng-Robinson, equations of state, Simulation.

SOMMAIRE

SOMMAIRE

REMERCIEMENTS	I
RESUME	II
ABSTRACT	III
SOMMAIRE	IV

INTRODUCTION GENERALE	1
-----------------------------	---

CHAPITRE I:ELEMENTS BIBLIOGRAPHIQUE

I.1. Introduction	2
I.2. Le Gaz naturel	3
I.2.1. La composition chimique du gaz naturel	3
I.2.2. Propriétés et caractéristiques du Gaz naturel.....	4
I.2.3. Les types de gaz naturel	5
I.2.3.1. Le gaz sec	5
I.2.3.2. Le gaz humide	6
I.2.3.3. Le gaz a condensât	6
I.2.3.4. Le gaz associé	6
I.2.4. Avantages et inconvénients du Gaz naturel	6
I.2.4.1. Avantages	6
I.2.4.2. Inconvénients	6
I.2.5. Traitement du Gaz naturel	7
I.2.5.1. Séparation des condensats	7
I.2.5.2. Opérations de fractionnement et de purification	7
I.2.5.3. Déshydratation	8
I.2.5.4. Fractionnement des hydrocarbures	8
I.2.5.5. Désacidification	8

I.2.6. Utilisation de Gaz naturel	9
I.3. L'eau dans le gaz	10
I.4. Hydrates de gaz	11
I.5. Conclusion	13

Chapitre II: LES MODELES DE DESHYDRATATION DE GAZ ET LES DIFFERENTS EQUATIONS D'ETAT

II.1. Introduction	14
II.2. Déshydratation du Gaz	15
II.2.1. Méthodes de déshydratation	15
II.2.1.1. Comparaison des méthodes	18
II.2.2. Glycols utilisés pour la déshydratation	19
II.2.2.1. Tri-éthylène Glycol	20
II.2.3. Le processus de déshydratation de glycol	20
II.3. Thermodynamique	21
II.3.1. Théorie générale	21
II.3.1.1. L'équilibre de la phase	22
II.3.2. Les équations d'état	23
II.3.2.1. Les équations d'état cubiques	24
II.3.2.2. Les données critiques	24
II.3.3. L'équation d'état de Peng-Robinson	25
II.3.3.1. L'équilibre de la phase	25
II.3.4. Les équations d'état de Peng-Robinson-Stryjek-VERA	26
II.3.5. Règle de mélange de WONG-SANDLER	26
II.4. Conclusion	28

CHAPITRE III: MODELISATION ET SIMULATION DU PROCEDE EAU/GLYCOL

III.1. Introduction	29
---------------------------	----

III.2. Simulation	30
III.2. Elément de maillage	30
III.2.1.1. Bilan de matière	31
III.2.1.2. Equilibre	32
III.2.1.3. Sommation	33
III.2.1.4. Enthalpie	33
III.2.2. Séparation flash	34
III.2.2.1 Rachford-Rice	34
III.2.2.2. Henley-Rosen	37
III.2.3. Modèle de simulation	38
III.2.3.1. Données d'entrée	40
III.2.3.2. Le Logiciel MATLAB	40
III.2.4. Résultats de simulation	47
III.2.4.1. Cas 1	47
III.2.4.2. Cas 2	47
III.2.4.3. Cas 3	48
III.2.4.4. Cas 4	49
III.2.4.5. Cas 5	50
III.2.4.6. Cas 6	50
III.3. Simulation de procédé	51
III.3.1. Le programme de simulation du processus	51
III.3.1.1. HYSYS	51
III.3.2. Modélisation du procédé avec le simulateur HYSYS	51
III.3.2.1. Schéma du procédé	51
III.3.2.2. Schéma de simulation	52
III.3.2.3. Présentation du procédé	53
III.4.2.4. Constituants	55
III.3.2.5. Conditions opératoires	55

III.3.3 Résultats de simulation	58
III.3.3.1. Bilans de matière et énergie	58
III.4. Analyse et optimisation du procédé	59
III.5. Conclusion	60
CONCLUSION GENERALE	61
REFERENCES	
LISTE DES TABLEAUX	
LISTE DES FIGURES	

INTRODUCTION GENERALE

Le gaz naturel, est un combustible fossile issu de la lente transformation de matières organiques animales et végétales déposées au fond des mers. Au fil des millénaires, ces matières, soumises à de fortes températures et pressions, se sont transformées en hydrocarbures qui se présentent à nous aujourd'hui sous deux phases : liquide (pétrole) et gazeuse (gaz naturel).

Dans la phase gazeuse l'eau est un problème, en traitement du gaz et de transport par pipeline, Les principaux problèmes avec l'eau dans le gaz sont :

- La corrosion
- La formation de glace
- La formation d'hydrate

Ce travail a pour principal objectif de faire retirer l'eau du gaz. Cela fait avec la déshydratation. La déshydratation du gaz naturel est l'élimination de l'eau qui est associé avec les gaz naturels sous forme de vapeur. L'industrie du gaz naturel a reconnu que la déshydratation est nécessaire pour assurer le bon fonctionnement des lignes de transport de gaz. La déshydratation empêche la formation d'hydrates de gaz et réduit la corrosion. À moins que les gaz sont déshydratés, l'eau liquide peut se condenser dans les canalisations ligne, et réduisant sa capacité de débit. Plusieurs méthodes ont été développées pour déshydrater les gaz à l'échelle industrielle (comme l'adsorption ...).

Ce rapport sera structuré en trois chapitres, la première portera sur les généralités du gaz naturel la composition, propriétés et caractéristiques, traitement, utilisation de Gaz naturel. La deuxième partie aborde déshydratation du gaz, puis thermodynamique. La dernière partie présente les travaux réalisés sur la simulation des procédés avec le modèle MATLAB puis le simulateur HYSYS et notre résultat, en fin une conclusion générale.

CHAPITRE I:
ELEMENTS
BIBLIOGRAPHIQUES

I.1. Introduction:

Comme le pétrole, le gaz naturel est une énergie fossile ou énergie primaire, ne résultant pas de la transformation d'une autre énergie. Plus léger que le pétrole, c'est le plus léger des hydrocarbures. L'une des principales spécificités de la chaîne gazière concerne le transport, maillon essentiel et qui, en raison de la rigidité des moyens d'acheminement, présente de fortes contraintes.

I.2. Le Gaz naturel:

Le gaz naturel est un combustible fossile constitué d'un mélange d'hydrocarbures gazeux, dont le méthane (CH_4) est l'un des principaux constituants.

Formé par la transformation d'organismes morts il y a des millions d'années, le gaz naturel se trouve dans divers réservoirs souterrains, parfois associé à du pétrole.

Le gaz naturel est exploité pour la production de chaleur et d'électricité, ainsi que dans le cadre de processus industriels.

L'usage du gaz naturel s'est accru dans le contexte de prise de conscience environnementale de ces dernières décennies. Cet hydrocarbure est en effet moins polluant et moins riche en CO_2 que les autres hydrocarbures (charbon, pétrole). En outre, ses réserves sont plus importantes que celles du pétrole. [1]

I.2.1. La composition chimique du gaz naturel:

Le constituant principal du gaz naturel (GN) est le méthane (souvent plus de 80 %) ; viennent ensuite les hydrocarbures saturés (éthane, propane, butane, pentane) dont les proportions décroissent avec l'augmentation du nombre d'atomes de carbone et à des concentrations plus faibles, des hydrocarbures plus lourds.

Les hydrocarbures en C_3 et C_4 forment la fraction GPL (Gaz de Pétrole Liquéfié). La fraction la plus lourde correspondant aux hydrocarbures à cinq atomes de carbone ou plus (fraction C_{5+}) est appelée condensat (gazoline).

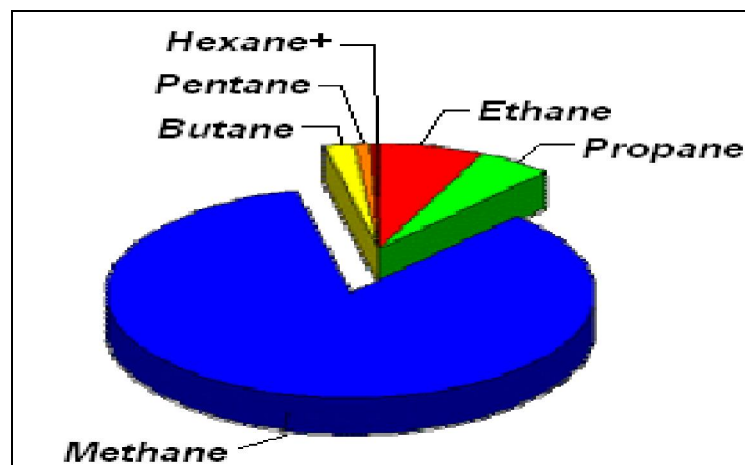


Figure I.1 : La composition chimique du gaz naturel.

La composition chimique d'un gaz est utilisée pour l'étude de vaporisation. Elle sert aussi à calculer certaines de ces propriétés en fonction de la pression et de la température (compressibilité, densité) et à définir les conditions de son traitement lors l'exploration (extraction des produits liquides). [1]

I.2.2. Propriétés et caractéristiques du Gaz naturel:

Le gaz naturel est incolore, inodore, insipide, sans forme particulière et plus légère que l'air. Il se présente sous sa forme gazeuse au delà de « -161°C ». Pour des raisons de sécurité, un parfum chimique, le mercaptan, qui lui donne une odeur spécifique, lui est souvent ajouté afin de permettre de détecter une fuite de gaz éventuelle.

Le gaz naturel n'est ni corrosif, ni toxique, sa température de combustion est élevée et il possède un intervalle restreint d'inflammabilité, ce qui en fait un combustible fossile sûr comparé à d'autres sources d'énergie. En outre, en raison de sa densité de 0,60, inférieure à celle de l'air, le gaz naturel a tendance à s'élever et peut, par conséquent, disparaître facilement du site où il se trouve par n'importe quelle fissure.

A la pression atmosphérique, si le gaz naturel est refroidi à une température de « -161°C » environ, il se condense sous la forme d'un liquide appelé le gaz naturel liquéfié (GNL). Un volume de ce liquide occupe environ le six centième d'un volume de gaz naturel et est deux fois moins lourd que l'eau (45% environ).

Le gaz naturel ne brûle dans l'air que dans une concentration de 5% à 15%.

Au stade final de son exploitation le gaz naturel peut être caractérisé par :

➤ Densité :

Elle est définie pour un gaz comme étant le rapport de sa masse volumique à celle de l'air dans les conditions déterminées de température et de pression. Comme elle peut être obtenue à partir de sa masse moléculaire que l'on peut définir au moyen de sa composition chimique en utilisant la relation :

Densité du gaz = Masse Moléculaire du gaz /28.966

28.966 : est la masse moléculaire de l'air.

➤ Pouvoir calorifique :

C'est la quantité de chaleur dégagée par la combustion d'une unité de volume du gaz, mesurée dans les conditions de référence. Le pouvoir calorifique pour le gaz naturel s'exprime en joules par mètre cube (J/M^3)

Il existe deux valeurs de pouvoir calorifique :

- Pouvoir calorifique supérieur :

Il correspond à la chaleur dégagée lorsque tous les produits de combustions sont ramenés à la température ambiante, l'eau formée étant à l'état liquide.

- Pouvoir calorifique inférieur :

Il correspond à la combustion, dans laquelle l'eau resterait à l'état vapeur. Le PCI diffère du PCS d'une quantité de chaleur qui est égale à la chaleur latente de vaporisation de l'eau.

➤ La masse volumique (kg / m^3) :

Représente la masse d'une unité de volume du gaz, elle est fonction de la température et de la pression

➤ Le volume massique (m^3 /kg) :

Il représente le volume occupé par une unité de masse. [1]

I.2.3. Les types de gaz naturel:

La présence et l'apparition d'une phase liquide avec le gaz selon les conditions de pression et la température dans le réservoir de gisement et en surface conduit à distinguer :

I.2.3.1. Le gaz sec:

Dans les conditions de production de ce gaz, il n'y a pas une formation de phase liquide et le gaz est concentré en méthane et contient très peu d'hydrocarbures plus lourds que l'éthane.

I.2.3.2. Le gaz humide :

Dans les conditions de production de ce gaz, il y'a une formation de phase liquide dans les conditions de surface et le gaz est moins concentré en méthane.

I.2.3.3. Le gaz a condensât:

Dans les conditions de production de se gaz, il y'a une formation de phase condensée riche en constituants lourds dans le réservoir.

I.2.3.4. Le gaz associé:

C'est un gaz de couverture qui contexte avec la phase d'huile dans réservoir d'huile (Gisement de pétrole).

I.2.4. Avantages et inconvénients du Gaz naturel:**I.2.4.1. Avantages:**

- Le gaz naturel est une source d'énergie relativement propre
- Le gaz naturel est une source d'énergie bon marché (le kWh de gaz naturel est environ deux fois moins cher que celui du fuel).
- Le gaz naturel possède un pouvoir calorifique raisonnable ($PCS=10 \text{ kWh/Nm}^3$)
- Le gaz naturel permet de produire de nombreux produits de base pour l'industrie chimique et pétrochimique, comme l'hydrogène, le méthanol et l'ammoniac.

Il est mieux réparti à la surface du globe que le pétrole, lequel a ses réserves massivement concentrées dans les pays du Moyen Orient.

Il contient moins de constituans mineurs produisant de la pollution locale (soufre, particules, métaux lourds, etc.) que le pétrole ou le charbon. [1]

I.2.4.2. Inconvénient:

- Les réserves de gaz naturel sont limitées.
- Le délicat stockage du gaz naturel.
- Le prix du gaz naturel est indexé sur celui du pétrole. [1]

I.2.5. Traitement du Gaz naturel:

Un gaz naturel brut est rarement transporté et utilisé en l'état. Le producteur est, en effet, contraint de livrer à la consommation un gaz conforme aux spécifications réglementaires édictées par les pouvoirs publics pour assurer la sécurité du transport et des usagers. Le gaz doit être sec, dans les conditions de température et pression de transport, c'est-à-dire qu'il ne devra pas présenter de phase liquide sous forme d'eau ou d'hydrocarbures, et être débarrassé des composés acides ou des corps toxiques comme l'hydrogène sulfuré.

La répartition des traitements entre les lieux de production et de livraison résulte de considérations économiques. Il est généralement préférable de ne réaliser sur le site de production que les seuls traitements qui rendent le gaz transportable. [2]

I.2.5.1. Séparation des condensats:

A la sortie des puits, dans le cas d'un gaz associé ou à condensat, le gaz naturel se trouve en présence d'une phase liquide. Dans certaines circonstances, notamment en mer, cette phase liquide peut être transportée en même temps que le gaz, en milieu bi-phasique. Néanmoins, elle est nécessairement séparée à un stade ultérieur, le gaz devant encore subir des opérations de traitement complémentaires avant d'être envoyé dans le réseau de distribution.

Dans une première étape, la phase liquide est séparée à une pression proche de la pression en tête de puits. Elle contient alors, surtout lorsque la pression est relativement élevée, une proportion importante de méthane et d'hydrocarbures légers dissous et doit être 'stabilisée' par réduction de la pression. Cette opération permet de produire, d'une part du gaz supplémentaire et d'autre part une phase liquide, condensat ou 'huile', pouvant être stockée et transportée à la pression atmosphérique.

I.2.5.2. Opérations de fractionnement et de purification:

L'ajustement requis de la teneur en eau, en gaz acides et hydrocarbures lourds, est réalisé par des opérations de traitement, qui permettent de purifier le gaz naturel en séparant les constituants à éliminer du gaz traité. Ces opérations de traitement font appel

à des procédés de séparation divers : absorption par solvant, adsorption, fractionnement par réfrigération, perméation gazeuse.

I.2.5.3. Déshydratation:

La présence d'eau entraîne différents problèmes pour les exploitants : suivant les conditions de température et de pression qui règnent dans une installation, la vapeur d'eau peut condenser et provoquer la formation d'hydrates, se solidifier ou favoriser la corrosion si le gaz contient des acides.

Pour éviter ces phénomènes, il est nécessaire de réduire la teneur en eau du gaz naturel au moyen de techniques de traitement appropriées.

La déshydratation du gaz naturel est réalisée par différents types de procédés : adsorption, absorption, perméation gazeuse.

I.2.5.4. Fractionnement des hydrocarbures:

Lorsque le gaz naturel contient une fraction relativement importante d'hydrocarbures autre que le méthane (gaz à condensat ou gaz associé), la séparation d'au moins une partie de ces hydrocarbures peut devenir nécessaire pour éviter la formation d'une phase liquide au cours du transport.

Cette opération est en général réalisée par abaissement de température avec formation d'une phase liquide ; elle peut être également effectuée par une opération d'absorption ou d'adsorption.

I.2.5.5. Désacidification:

La désacidification consiste à séparer du gaz naturel les gaz acides, essentiellement CO₂ et H₂S. Comme nous l'avons vu, l'élimination de l'hydrogène sulfuré doit être en général beaucoup plus poussée que celle du dioxyde de carbone.

Les principaux procédés utilisés pour réaliser la désacidification font appel à l'absorption, la sélectivité du solvant vis-à-vis des gaz acides étant basée sur une affinité soit de type chimique, soit de type physique, l'adsorption est également employée pour réaliser des purifications poussées. [2]

I.2.6. Utilisation de Gaz naturel:

Le gaz naturel est une source d'énergie qui peut être employée dans des domaines très variés. Traditionnellement, la fourniture le chauffage et l'électricité en sont les principaux débouchés. En outre, les préoccupations grandissantes liées à la protection de l'environnement devraient conduire à accroître encore le recours au gaz naturel dans les transports.

- Utilisateurs domestiques : Les applications domestiques sont les principaux débouchés du gaz naturel. Ce dernier peut être utilisé pour cuisiner, laver, sécher, faire chauffer de l'eau, chauffer une maison ou la climatiser.
- Applications commerciales : Les principaux utilisateurs commerciaux de gaz naturel sont les fournisseurs de services (restaurants, hôtels, services médicaux, bureaux, etc.). Les applications commerciales du gaz naturel incluent la climatisation (air conditionné et réfrigération), la cuisson et le chauffage.
- Industrie : Le gaz naturel entre dans la fabrication de la pâte à papier, du papier, de certains métaux, produits chimiques, pierres, argile, verre et dans la transformation de certaines denrées. Il peut également être employé pour le recyclage des déchets, pour l'incinération, le séchage, la déshumidification, le chauffage, la climatisation et la cogénération, engrais, résines, plastiques, solvants, Raffinage du pétrole.
- Production d'électricité : Les installations électriques et les fournisseurs d'énergie indépendants emploient de plus en plus le gaz naturel pour alimenter leurs centrales du fait de son coût d'exploitation. En général, les centrales fonctionnant au gaz naturel sont moins coûteuses, plus rapides à construire, plus productives et moins polluantes que des centrales utilisant d'autres combustibles fossiles.
- Industrie automobile : Le gaz naturel peut être utilisé comme combustible pour les véhicules à moteur de deux manières : gaz naturel comprimé (GNC), qui est la forme la plus répandue ou en tant que gaz naturel liquéfié (GNL).
- Piles à combustible : La pile à combustible est un dispositif électrochimique qui permet de combiner l'hydrogène et l'oxygène contenus dans l'air afin de produire

de l'électricité, de la chaleur et de l'eau. Le gaz naturel est un des multiples combustibles à partir desquels les piles à combustible peuvent fonctionner. [2]

I.3. L'eau dans le gaz :

L'eau est un problème dans la phase gazeuse, en traitement du gaz et de transport par pipeline.

Les principaux problèmes avec l'eau dans le gaz sont :

- La corrosion
- La formation de glace
- La formation d'hydrate

Dans les pipelines où il est connu que le gaz est humide, le problème peut être contrôlé. Si c'est connu dans la phase de conception que du pipeline peut être conçu avec la corrosion plus résistante les matériaux ou l'épaisseur matérielle accrue. Si le problème se produit lors de la production, le problème peut être minimisé en injectant des inhibiteurs dans le gaz.

Dans les pipelines de gaz sec les problèmes ne devraient pas se produire, mais peut se produire en cas de déshydratation. Si ne pas découvert les problèmes sont plus sérieuses ici, parce que les pipelines ne sont pas conçus pour ces conditions. Lorsque les inhibiteurs des découvertes peuvent être ajoutés avant déshydratation adéquate est de nouveau disponible.

La formation de glace est seulement un problème lorsque les températures sont suffisamment basses pour glace à formulaire. La glace est particulièrement un problème dans l'équipement de processus et de vannes, où la glace peut créer des blocages. Glace sont viril un problème dans le traitement des gaz à basse température. [3], [4]

I.4. Hydrates de gaz :

Les hydrates de gaz sont des cristaux de gaz naturel. Les hydrates de gaz sont une structure en cage contenant une molécule de gaz comme le méthane, la cage est formée par l'eau par le biais de liaisons d'hydrogène, comme illustré dans la Figure I.5. Parce que les cristaux de l'hydrate de gaz sont semblables à des cristaux de glace, les problèmes avec les hydrates de gaz sont semblables aux problèmes avec la glace.

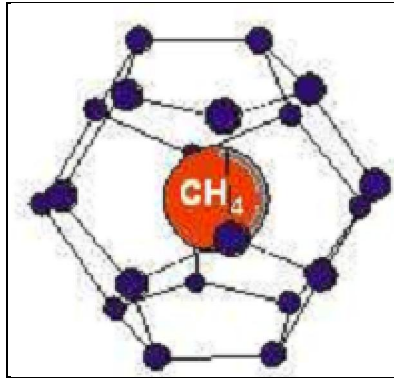


Figure I.2: L'hydrate de gaz.

Parce que les hydrates peuvent se former dans les canalisations, grandes quantités d'hydrates peuvent être dans le gaz simultanément ; ce qui peut créer des bouchons dans la canalisation. En raison de l'hydrate potentiellement élevé contenu dans le gaz, le blocage peut se produire dans quelques minutes sans aucun avertissement préalable.

Prévention :

En raison des dangers potentiels d'hydrates de gaz qui doivent être évités. Il existe plusieurs méthodes pour empêcher la formation d'hydrates de gaz, elles sont :

- Déshydratation du gaz
- L'élévation de la température
- Réduction de la pression
- L'addition des inhibiteurs

La déshydratation du gaz est le moyen le plus efficace pour prévenir la formation des hydrates, mais il peut y avoir une limitation pratique à l'utilisation de la déshydratation, par exemple une seule unité centrale de déshydratation. Si le gaz ne peut pas être déshydraté, une des autres méthodes de prévention doit être utilisée. L'élévation de la température d'une canalisation n'est pas très pratique, même la réduction la

pression, parce que la réduction permettra la réduction de débit de la canalisation. La seule solution est donc l'addition des inhibiteurs au gaz.

Inhibiteurs :

Les Inhibiteurs agissent comme antigel dans le gaz, les inhibiteurs habituels sont :

- Alcools
- Glycols

Le Méthanol et le mono-éthylène glycol (MEG) sont des inhibiteurs les plus couramment utilisées, des faibles doses sont souvent injectées en continu dans la canalisation où la formation d'hydrate est un problème. Des doses plus élevées de surtout le méthanol sont utilisés temporairement pour dissoudre les bouchons de l'hydrate.

Il y a des autres inhibiteurs possibles qui empêchent la formation d'hydrates sont :

- Sels
- L'ammoniac
- Mono-éthanol amine

Les sels sont rarement utilisés en raison du risque de corrosion et des résidus. L'ammoniac est toxique, corrosif et peut former des résidus solides des carbonates obtenus avec le dioxyde de carbone et l'eau. Le Mono-éthanol amine est seulement intéressant après la canalisation de transport est utilisé (et ainsi récupéré) pour l'édulcorant de gaz.

I.5. Conclusion :

Le gaz naturel est composé de 95 % de méthane, moins de 4 % d'éthane et d'azote, ainsi de 1 % de dioxyde de carbone et de propane.

Il provient de la transformation naturelle de matières organiques pendant des millions d'années.

Le gaz naturel est la troisième source d'énergie le plus utilisée dans le monde (après le pétrole et le charbon), principalement dans :

- La production de chaleur pour la cuisson et le chauffage
- Le secteur industriel, comme matière première pour l'industrie chimique (pétrochimie et raffinage)
- La production d'électricité
- Les transports : le gaz naturel pour véhicules (GNV) est de plus en plus utilisé pour les transports publics urbains comme les bus ou les camions-bennes.

**Chapitre II: LES
METHOES DE
DESHYDRATATION DE
GAZ ET LES
DIFFERENTS
EQUATIONS D'ETAT**

II.1. Introduction :

L'élimination de l'eau dans le gaz est essentiellement nécessaire pour diminuer les problèmes liés à l'eau dans le gaz. Ce qui rend le processus de la déshydratation essentiel pour le traitement du gaz.

La première étape de la simulation d'une unité de déshydratation est l'étude de la conception de processus. L'étape suivante est la simulation ; la simulation est calculée avec les équations de la thermodynamique. Les équations de la thermodynamique sont à l'origine créées pour les constituants non polaires comme les hydrocarbures. La partie principale de la simulation du processus de déshydratation est le calcul de l'interaction du mélange Eau/Glycol.

II.2. Déshydratation du gaz: [5]

Dans les conditions normales de production, le gaz naturel est saturé avec vapeur d'eau. Les constituants de vapeur d'eau dans le gaz naturel peuvent causer beaucoup de problèmes surtout dans le flux de canalisations. Le processus qui implique l'élimination de l'eau peut être connu comme le processus de déshydratation. Ce processus est un processus important pour exploiter le gaz naturel.

Il existe 4 types de processus pour éliminer le contenu de l'eau qui sont l'absorption, l'adsorption, la perméation gazeuse et la réfrigération. Seulement deux processus sont largement utilisés dans l'industrie qui sont l'absorption et l'adsorption.

II.2.1. Méthodes de déshydratation :

Processus de l'absorption : [5]

La déshydratation de Glycol est un processus d'élimination de l'eau du gaz naturel à l'aide du Glycol. C'est le moyen plus économique et commun d'élimination de l'eau de gaz. Il existe plusieurs types de glycol utilisés dans l'industrie, mais le plus couramment et largement utilisé est le tri-éthylène glycol.

Pour le processus, le tri-éthylène glycol est alimenté vers le haut de l'absorbeur où il est en contact avec le flux de gaz naturel humide. Le glycol élimine l'eau du gaz naturel par absorption physique et est effectué par le bas de la colonne. Le gaz naturel sec quitte le haut de la colonne d'absorption et est alimenté à un système de canalisation ou à une usine de gaz.

Après avoir quitté l'absorbeur, le glycol riche est alimenté à un flash récipient où les vapeurs d'hydrocarbures sont éliminées et les hydrocarbures liquides sont écrémés de glycol. Cette étape est nécessaire car l'absorbeur est habituellement exploité à haute pression et la pression doit être réduite avant l'étape de régénération. En raison de la composition du glycol riche, une phase vapeur est formée lorsque la pression est abaissée ayant une teneur élevée d'hydrocarbures.

Après avoir quitté le flash récipient, le glycol riche est chauffé dans un échangeur à contre courant et alimenté à le stripper (également connu comme le régénérateur). Le Glycol stripper se compose d'une colonne, un condenseur au-dessus et un rebouilleur.

Le glycol est thermiquement régénéré pour enlever l'excès d'eau et de retrouver la pureté du glycol élevé.

Le chaud pauvre Glycol est refroidi par échange a contre courant avec le Glycol riche entrant dans le stripper. Il est ensuite alimenté à une pompe où la pression est élevée à celle de l'absorbeur de glycol. Après l'augmentation de la pression, le solvant pauvre est refroidi à nouveau avec un trim cooler avant d'être alimenté à l'absorbeur.

Processus d'adsorption :

Le schéma de principe d'une opération de déshydratation par adsorption en lit fixe est représenté sur la figure ci-après, Le procédé fonctionne d'une manière alternée et périodique.

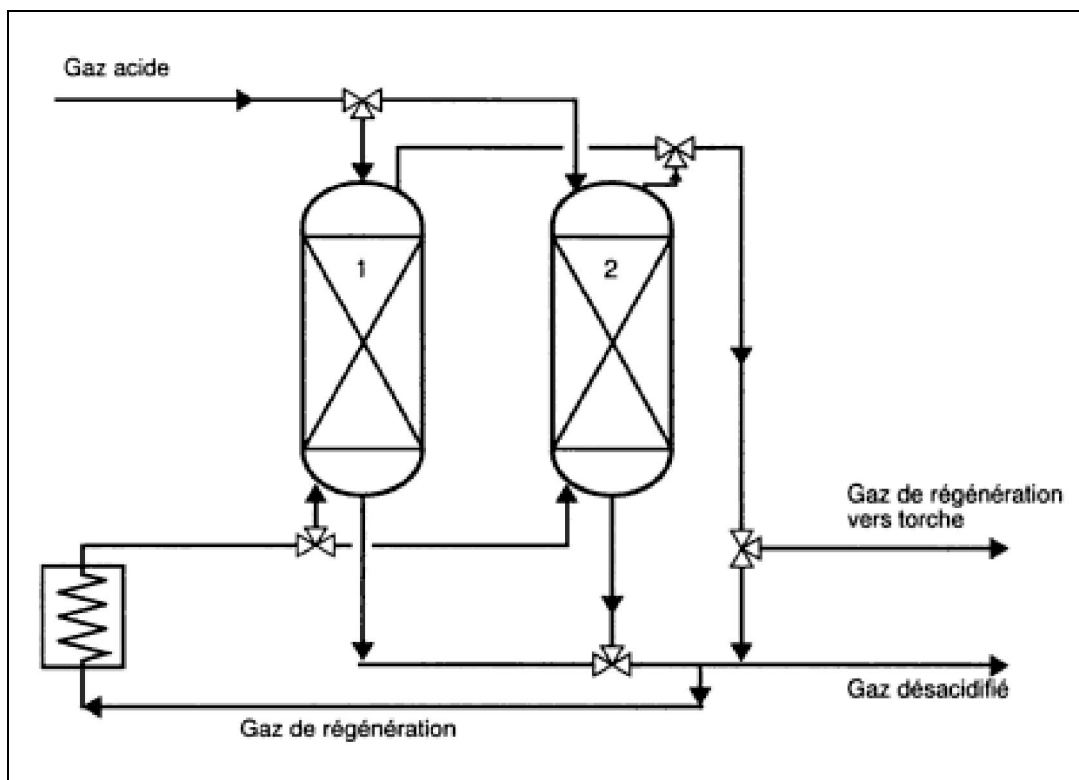


Figure II.1: Procédé de déshydratation par adsorption. [6]

Au cours de l'étape d'adsorption, le gaz traité est envoyé sur le lit d'adsorbant qui fixe l'eau. Lorsque le lit est saturé, du gaz chaud est envoyé pour régénérer l'adsorbant,

Après régénération et avant l'étape d'adsorption, le lit doit être refroidi, ceci est réalisé en envoyant du gaz froid, après réchauffage, ce même gaz peut servir à effectuer la régénération.

Pour un adsorbant soit efficace, il doit présenter les caractéristiques suivantes :

- Capacité d'adsorption à l'équilibre importante ;
- Adsorption réversible permettant de régénérer l'adsorbant ;
- Cinétique d'adsorption rapide ;
- Faible perte de charge;
- Pas d'effet de dilatation de volume avec la température et la saturation.

Déshydratation par perméation gazeuse :

Le schéma de principe d'une opération de séparation par perméation gazeuse est représenté sur la figure ci-dessous :

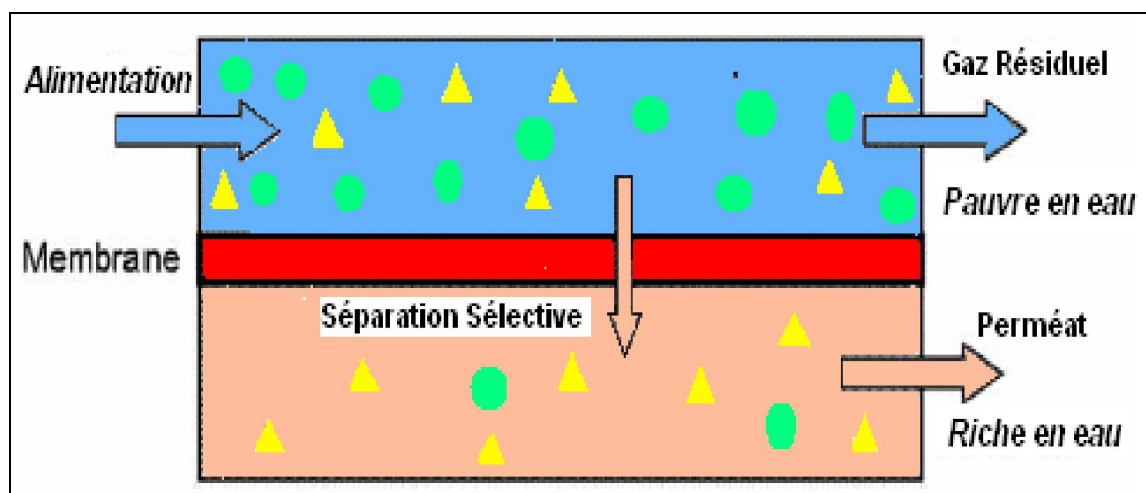


Figure II.2 : Schéma de principe de perméation gazeuse. [7]

Pour que la séparation soit efficace, la membrane doit être très perméable vis-à-vis de l'impureté à séparer, qui passe à travers la membrane sous l'effet de la pression et très peu perméable vis-à-vis du méthane.

Les procédés de séparation par membranes mettent en jeu des surfaces de membranes élevées, qui s'expriment généralement en milliers de mètres carrés. [6]

Par réfrigération :

La déshydratation du gaz par réfrigération est un procédé de déshydratation à faible coût. L'eau se condense quand le gaz est refroidi ; l'eau est ensuite retirée dans un séparateur. La méthode de séparation peut être effectuée plusieurs fois. La méthode est plus efficace à haute pression. La quantité d'eau dans le processus de réfrigération est souvent insuffisante. En raison du faible coût du processus de réfrigération sont souvent utilisés avant les autres processus de déshydratation. [8]

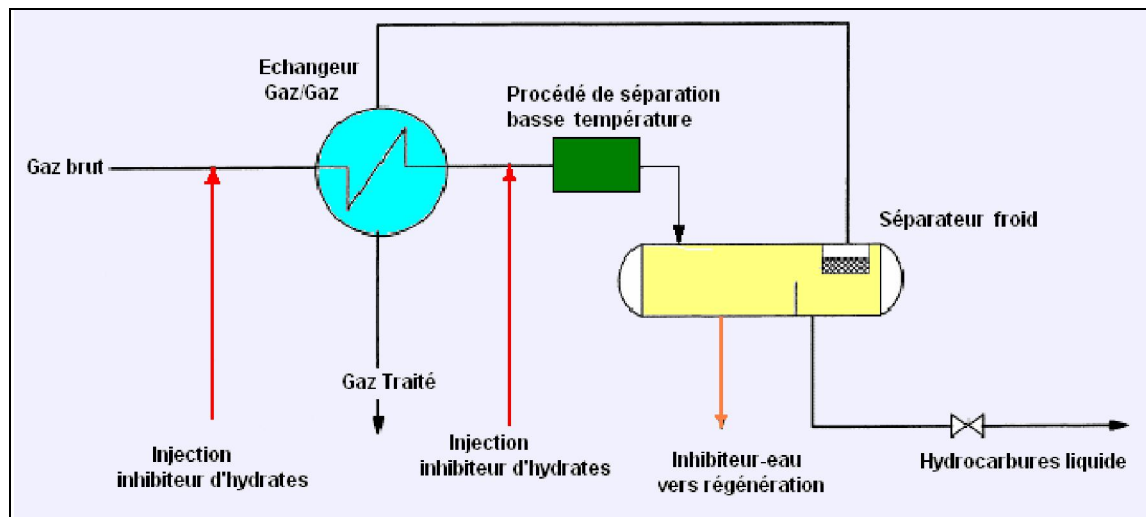


Figure II.3 : Déshydratation par abaissement de la température.

II.2.1.1. Comparaison des méthodes :

Les deux méthodes les plus efficaces de la déshydratation sont l'absorption et l'adsorption. L'absorption avec le Glycol est la méthode préférée de déshydratation car il est plus économique que l'adsorption. Ceci est dû aux différences entre l'absorption et l'adsorption suivantes :

- L'adsorbant est plus cher que le Glycol.
- elle nécessite plus d'énergie pour régénérer l'adsorbant que le Glycol.
- Le remplacement de Glycol est beaucoup moins cher que le remplacement d'un lit d'adsorption.
- Le Glycol peut être modifié en continu, tandis que la modification d'un lit d'adsorption nécessite un arrêt.

II.2.2. Glycols utilisés pour la déshydratation :

Le Glycol est un nom commun pour les diols ; avec les deux alcools, ces substances ont une grande affinité pour l'eau. Dans la déshydratation 1,2-éthandiol également connu sous le nom Mono-éthylène glycol (MEG) et les petits polymères de MEG (di-éthylène glycol (DEG), tri-éthylène glycol (TEG) et le tétra-éthylène glycol (TREG)) sont les plus couramment utilisés pour des matériaux absorbants.

Les propriétés de MEG, DEG, TEG, TREG et l'eau sont comparées dans le tableau II.1.

Tableau II.1: propriétés de MEG, DEG, TEG, TREG et l'eau. [9], [3]

	MEG	DEG	TEG	TREG	EAU
Formule	C2H6O2	C4H10O3	C6H14O4	C8H18O5	H2O
Masse molaire [kg/kmole]	62.07	106.12	150.17	194.23	18.015
Point d'ébullition normale [° C]	197.1	245.3	288.0	329.7	100.0
Pression de vapeur @ 25 ° C [Pa]	12.24	0.27	0.05	0.007	3170
Densité @ 25 ° C [kg/m ³]	1110	1115	1122	1122	55.56
Viscosité @ 25 ° C [cP]	17.71	30.21	36.73	42.71	0.894
Viscosité @ 60 ° C [cP]	5.22	7.87	9.89	10.63	0.469
Température maximale recommandée de la régénération [°C]	163	177	204	224	-
Début de la décomposition [°C]	-	240	240	240	-

Dans le tableau II.1, les valeurs importantes sont le point d'ébullition normal, la pression de vapeur, la viscosité, la température maximale recommandée de la régénération et le début de la décomposition.

Le point d'ébullition normal et la pression de vapeur à une influence dans la distillation. La séparation entre l'eau et le Glycol est importante parce que le contenu de l'eau dans le Glycol pauvre détermine la quantité d'eau que le Glycol peut retirer le gaz.

Les plus grands polymères TEG et TREG ont les meilleures propriétés de déshydratation. TREG a des propriétés légèrement mieux que le TEG, mais en raison du

coût supplémentaire de TREG, TEG offre le meilleur compromis coût/bénéfice et est donc la plus couramment utilisée de glycol. [3]

Lorsque le TEG se décompose il devient MEG et DEG, donc il n'influencera pas sur le processus de déshydratation, seulement donnent une perte de glycol légèrement plus grande parce que MEG et DEG sont plus volatile que le TEG. [3], [4], [10], [11]

II.2.2.1. Tri-éthylène Glycol: [12]

Le Tri-éthylène glycol (TEG), est un liquide incolore, inodore, non volatile et hygroscopique. Il est caractérisé par deux groupes hydroxyles avec deux liaisons d'éther, qui contribuent à sa haute solubilité à l'eau, hygroscopicité, propriétés de solvants et de réactivité avec de nombreux composés organiques.

Le TEG remplace di-éthylène Glycol (DEG) dans un grand nombre de ces applications en raison de sa toxicité plus faible. Le TEG est utilisé comme un plastifiant vinyle, comme un intermédiaire dans la fabrication de résines polyesters et polyols, et comme un solvant dans de nombreuses applications diverses.

II.2.3. Le processus de déshydratation de Glycol:

Le processus de déshydratation peut être divisé en deux parties, la déshydratation du gaz et de régénération de Glycol. Dans la déshydratation, l'eau est retirée du gaz à l'aide de Glycol et dans la régénération l'eau est retirée de l'éthylène Glycol, avant il peut être réutilisé pour la déshydratation.

La Déshydratation :

La déshydratation se compose toujours d'un inlet scrubber et un contacteur (contacteur). Parfois il est préférable d'abaisser la température d'entrée de gaz avant la déshydratation, donc un inlet cooler peut également être utilisé.

La Régénération :

La fonction principale du système de régénération de Glycol peut être divisée en trois :

1. Réalisation des conditions optimales de température et de pression pour la régénération de Glycol riche.
2. Régénération de glycol.

3. Réajuster température et pression de Glycol pour des conditions optimales de déshydratation dans le contacteur (contacteur).

Plus de ces trois points principaux, il y a quelques fonctionnalités supplémentaires peut considération lors de la conception d'une usine de déshydratation :

- Installation d'un séparateur flash avant de la colonne de régénération. Ce séparateur élimine la majorité des hydrocarbures dans le dissous de Glycol.
- Filtrage du Glycol riche, s'il y a des particules solides ou hydrocarbures liquides dans le Glycol.
- Intégration des échangeurs de chaleur, donc le Glycol pauvre est refroidi par rubrique du Glycol riche, ainsi réduction de la consommation d'énergie.
- Compensation de Glycol pour remplacer la perte de Glycol, par exemple dans un réservoir de stockage.

En raison de ces considérations, la conception du processus de régénération varie avec la conception de l'usine. L'intégration des échangeurs de chaleur est particulièrement importante, car cela réduit la consommation d'énergie globale de l'usine.

II.3. Thermodynamique :

La thermodynamique est utilisée pour décrire la relation entre l'énergie, la température, la pression et le volume pour les constituants et les mélanges purs. L'exemple classique de la relation entre ces différents facteurs est la machine à vapeur, où l'énergie est transformée de la chaleur au travail par le biais de propriétés thermodynamiques des eaux.

Dans un processus de simulation, la thermodynamique est utilisée pour calculer la relation entre la consommation/libération d'énergie, la pression, la température, le volume et l'équilibre de la phase.

II.3.1. Théorie générale :

Il y a quelques relations générales dans le calcul thermodynamique ; Ces seront décrite dans cette section. Ces sont les calculs d'équilibre de phase, qui sont utilisés pour déterminer les changements de phase et la distribution de constituants entre les phases. C'est l'excès d'énergie qui influence le comportement des liquides non-idéales. Et enfin,

c'est les équations d'état, qui sont utilisées pour calculer le comportement des constituants chimiques.

II.3.1.1. L'équilibre de la phase :

Dans un récipient avec deux (ou plus) phases, il sera un équilibre entre les phases. L'équilibre de phase dépend de la température, la pression et la composition de phase.

La base de calcul d'équilibre de la phase est la fugacité f . La fugacité décrit la tendance de constituants pour préférer une phase sur l'autre. Les constituants se déplacent des phases avec grande fugacité à des phases avec fugacité faible. À l'équilibre, les fugacités des constituants sont identiques dans chaque phase, comme la suite :

$$f_i^I = f_i^{II} \quad \text{II.1}$$

La fugacité est une forme de pression ajustée, la relation entre la fugacité et la pression réelle est décrite par le coefficient de fugacité φ , comme la suite :

$$\varphi = \frac{f}{P} \quad \text{II.2}$$

Pour un gaz idéal, la fugacité est égale à la pression. Alors le coefficient de fugacité égale à 1. La taille du coefficient de fugacité peut donc être utilisée pour décrire le comportement non idéal de la phase vapeur. Même si φ décrit le comportement de vapeur non idéale il influence également la fugacité de phases liquides. La fugacité de la phase gazeuse est définie comme (II.3) et comme (II.4) pour la phase liquide :

$$f_i^V = P \cdot \varphi_i^V \cdot y_i \quad \text{II.3}$$

$$f_i^L = P \cdot x_i \cdot \varphi_i^L \cdot \gamma_i \quad \text{II.4}$$

Le coefficient d'activité γ décrit le comportement non idéal de liquides, qui est due à l'énergie d'excès. La relation entre la constante de l'activité et de l'énergie d'excès de Gibbs est donnée par la suite:

$$\ln \gamma_i(T, P, \underline{x}) = \frac{\overline{G}_i^{ex}(T, P, \underline{x})}{RT} \quad \text{II.5}$$

II.3.2. Les équations d'état :

Le comportement d'un gaz peut être décrit par la compressibilité Z .

$$Z = \frac{PV}{RT} \quad \text{II.6}$$

Z décrit la relation entre la température, la pression et le volume molaire d'un gaz. Un cas particulier de (II. 6), pour $Z = 1$ est mieux connu sous le nom de la Loi des gaz parfaits. La Loi des gaz parfaits (II. 7), est le premier exemple d'une équation d'État :

$$P = \frac{RT}{\underline{V}} \quad \text{II.7}$$

La Loi des gaz parfaits est une forme très simple d'une équation d'état. Tous les gaz approchent cependant l'état de gaz idéal, lorsque la pression diminue, ou le volume molaire tend vers l'infini.

Lorsqu'il s'agit des fluides réels, la Loi des gaz parfaits doit être remplacée par une équation d'état plus précise. La première équation d'état valide pour des situations non idéales qui ont été créées est l'équation d'état de van der Waals (VDW) :

$$P = \frac{RT}{\underline{V}-b} - \frac{a}{\underline{V}^2} \quad \text{II.8}$$

Dans l'équation (II.8), **a** et **b** sont des facteurs de correction pour tenir compte des conditions non idéales. La valeur de **a** décrit la taille de la molécule du fluide, alors que la valeur de **b** donne le volume de la molécule d'une pression infinie, ou à la température absolu zéro. **a** et **b** sont définis à partir des données critiques de constituants. Le VDW était une amélioration définitive de la Loi des gaz parfaits, bien que la précision puisse être améliorée de plus. Une telle amélioration était pour faire l'équation d'état de la température dépendant. Cela a été la base pour plusieurs équations d'état plus précises, les plus communs sont l'équation d'état de Soave-Redlich-Kwong (SRK) (II.9) et l'équation d'état de Peng-Robinson (PR) (II.10) :

$$P = \frac{RT}{\underline{V}-b} - \frac{a(T)}{\underline{V}(\underline{V}+b)} \quad \text{II.9}$$

$$P = \frac{RT}{\underline{V}-b} - \frac{a(T)}{\underline{V}(\underline{V}+b)+b(\underline{V}-b)} \quad \text{II.10}$$

II.3.2.1. Les équations d'état cubiques :

Dans l'équation d'état cubique, les formes classiques de l'équation d'état ont été réorganisées en fonction du facteur de compressibilité Z . Les équations cubiques peuvent être généralisées comme suite :

$$Z^3 + \alpha Z^2 + \beta Z + \gamma = 0 \quad (\text{II.11})$$

L'équation (II.11) est valide pour les différentes équations d'état, ils seulement différent dans la spécification de α , β et γ , Z est définie dans (II.6). Lorsque α , β et γ sont connus, Z peut être calculé à l'aide de la méthode de Newton-Raphson par exemple, la définition de α , β et γ pour les différentes équations d'état est donnée dans le tableau II.2.

Tableau II.2: α , β et γ dans l'équation d'état sélectionné.

	VDW	SRK	PR
α	-1-B	-1	-1+B
β	A	A-B-B ²	A-3B ² +2B
γ	-AB	-AB	-AB+B ² +B ³

Les variables A et B dans le tableau II.2 sont décrits dans (II.12) et (II.13) :

$$A = \frac{aP}{(RT)^2} \quad \text{II.12} \quad \text{et} \quad B = \frac{bP}{RT} \quad \text{II.13}$$

II.3.2.2. Les données critiques :

Les facteurs a et b dans l'équation d'état sont utilisées pour décrire comment les vrais constituants réagissent. Ils sont basés sur la température critique (T_C) et la pression (P_C) pour les constituants.

VDW a été la première équation d'état qui utilise les données critiques dans le calcul, mais la précision nécessite encore quelques améliorations, notamment au point critique. La compressibilité au point critique (Z_C) dans VDW est toujours 0,375, tandis que Z_C de pluparts des fluides réelles varie de 0,23 et 0,31.

Le problème peut être corrigé en spécifiant un autre plus paramètre, Z_C est une suggestion évidente, le paramètre est malheureusement difficile à déterminer avec une

grande précision pour nombreuses substances. Un autre paramètre, le facteur acentrique ω , qui est plus facile à mesurer, comme le montre dans l'équation suivante:

$$\omega = -1.0 - \log_{10} \left[\frac{P^{vap}(T_r=0.7)}{P_c} \right] \quad \text{II.14}$$

$$\text{Avec} \quad T_r = \frac{T}{T_c}$$

II.3.3. L'équation d'état de Peng-Robinson :

Les facteurs inconnus dans la résolution de l'équation d'état cubique sont a et b, ils sont calculés à partir des données critiques pour les constituants. En PR (II.10) a est la fonction de la température, il est donné par la suite :

$$a(T) = 0.457235 \frac{R^2 T_c^2}{P_c} \cdot \alpha(T) \quad \text{II.15}$$

Le dernier terme de (II.15) est donné dans la suite:

$$\alpha(T) = \left[1 + k \left[1 - \sqrt{\frac{T}{T_c}} \right] \right]^2 \quad \text{II.16}$$

$$\text{Avec} \quad \kappa = 0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2 \quad \text{II.17}$$

Le calcul avec PR jusqu'ici a seulement été pour les systèmes d'un seul constituants. Pour les mélanges les valeurs de **a** et **b** doivent être combinés avec une valeur pour le mélange.

II.3.3.1. L'équilibre de la phase :

Lors du calcul de l'équilibre de phase, la fugacité pour les différentes constituants de chaque phase est calculée. Il existe des formules pour calculer le coefficient de fugacité à partir de facteur de compressibilité, les formules diffèrent avec la différente l'équation d'état.

Le coefficient de fugacité pour PR peut être calculé avec l'équation (II.18), qui est pour la phase liquide. L'équation est identique à l'équation de la phase vapeur, bien que les constantes utilisées doivent être de la phase de calculée.

$$\ln \phi^L = (Z^L - 1) - \ln \left[Z^L - \frac{bP}{RT} \right] - \frac{a}{2\sqrt{2}bRT} \ln \left[\frac{Z^L + (1+\sqrt{2})\frac{bP}{RT}}{Z^L + (1-\sqrt{2})\frac{bP}{RT}} \right] \quad \text{II.18}$$

Le calcul d'équilibre de la phase est essentiel dans le calcul de la distribution des constituants dans le cas multiphasique.

II.3.4. Les équations d'état de Peng-Robinson-Stryjek-VERA :

La modification de Stryjek-Vera de PR est introduite pour augmenter la précision des calculs pour les composés polaires en PR, donc la création de l'équation d'état de Peng-Robinson-Stryjek-Vera (PRSV). La base de PRSV est la modification des calculs de κ dans (II.17). Le calcul de PRSV de κ est plus précis, et comprend un terme qui décrit le comportement polaire des composés polaires. La modification de PRSV est décrite par les équations (II.19) et (II.20) respectivement:

$$k = k_0 + k_1(1 + \sqrt{T_r})(0.7 - T_r) \quad \text{II.19}$$

$$k_0 = 0.378893 + 1.4897153\omega + 0.17131848\omega^2 + 0.0196554\omega^3 \quad \text{II.20}$$

Le paramètre κ_1 est individuel pour les différents constituants, cela est particulièrement important pour les composés polaires purs.

L'introduction de PRSV nécessite quelques modifications dans le calcul de départ, car la dérivée da/dT dépend de la fonction κ . Le nouveau dérivé est montré dans l'équation suivante:

$$\frac{da}{dT} = -0.45724 \frac{R^2 T_C}{P_C} k \left[\frac{1 - \sqrt{T_r}}{T_r} \right] \quad \text{II.21}$$

II.3.5. Règle de mélange de WONG-SANDLER :

Des résultats satisfaisants peuvent être atteints pour les mélanges des liquides idéals, à l'aide de règle de mélange de Van Der Waals pour un fluide. Pour les mélanges non idéals, la précision est limitée par l'énergie d'excès. Dans ces cas, une règle de mélange plus précise incorporant l'énergie d'excès doit être utilisée. La règle de mélange de Wong-Sandler peut être utilisée avec tous les équations d'état, un seul paramètre doit être ajusté.

La règle de mélange de Wong-Sandler incorpore l'énergie d'excès et donne un meilleur ajustement de la condition limite pour **a** et **b** que la règle de mélange de Van

Der Waals. La règle de mélange est donnée en Wong-Sandler dans les équations suivantes:

$$\frac{a_m}{RT} = Q \frac{D}{1-D} \quad \text{II.22}$$

$$b_m = \frac{Q}{1-D} \quad \text{II.23}$$

Avec $Q = \sum_i \sum_j x_i x_j \left[b_{ij} - \frac{a_{ij}}{RT} \right]$ et $D = \sum_i x_i \frac{a_i}{b_i RT} + \frac{G_V^{ex}(T.P.\underline{x})}{C^* RT}$

La constante C^* est spécifique pour laquelle équation d'état en utilise la règle de mélange. Pour VDW, il est égal à -1 alors que la valeur de PR est :

$$C^* = \frac{\ln(\sqrt{2} - 1)}{\sqrt{2}} = -0.62323$$

Fugacité de règle mélange de Wong-Sandler :

Le calcul de la fugacité est plus compliqué lors de l'utilisation le règle de mélange de Wong-Sandler, due au fait que la définition de \mathbf{a}_m et \mathbf{b}_m est modifiée. Le nouveau calcul est donné par l'équation suivante:

$$\ln \bar{\varphi}_i(T.P.\underline{x}) = \frac{1}{b} \left[\frac{\partial N^2 a}{\partial N_i} \right]_{T.N_{j \neq i}} (Z - 1) - \ln \left[z - \frac{bP}{RT} \right] + \frac{a}{2\sqrt{2}bRT} \left[\frac{1}{N_a} \left[\frac{\partial N^2 a}{\partial N_i} \right]_{T.N_{j \neq i}} - \frac{1}{b} \left[\frac{\partial Nb}{\partial N_i} \right]_{T.N_{j \neq i}} \right] \ln \left[\frac{Z + (1 + \frac{\sqrt{2}bP}{RT})}{Z + \frac{(1 - \sqrt{2})bP}{RT}} \right] \quad \text{II.24}$$

II.4. Conclusion :

Plusieurs équations thermodynamiques d'état sont disponibles pour la simulation de processus. PR est un bon exemple des équations d'état, ce qui donne un résultat fiable de simulation des procédés des systèmes d'hydrocarbures. PRSV est désigné pour être plus précis que PR, surtout pour les composés polaires comme de l'eau.

Les deux équations d'état peuvent être utilisées soit avec la règle de mélange de van der Waals pour un fluide, soit avec la règle de mélange de Wong-Sandler. La règle de mélange de Wong-Sandler est préférée dans les cas où les mélanges des liquides non idéales sont impliqués comme le mélange Eau/Glycol.

Le Wong-Sandler nécessite des données d'entrée pour l'énergie d'excès de Gibbs et le coefficient d'activité. Ces données peuvent être calculées avec plusieurs modèles de coefficient de l'activité ; ici le modèle de multi constituants mélange est sélectionné. Ce modèle peut être utilisé pour calculer les deux l'énergie d'excès de Gibbs pour le mélange et les coefficients d'activité pour les constituants individuels, tout cela à partir des mêmes données d'entrée.

La principale préoccupation de la simulation est l'interaction entre l'eau et le Glycol. Ces deux éléments interagissent par l'attraction polaire entre les deux constituants, ce qui permet le Glycol d'absorber l'eau. Ce processus est compliqué pour simuler avec les équations thermodynamiques classiques comme PR. Pour corriger le problème, la règle de mélange de Wong-Sandler peut être utilisée.

Les équations de la thermodynamique ne peuvent pas isolée dans la simulation de processus ; ils doivent être accompagnés d'autres équations qui décrivent l'équipement de processus.

CHAPITRE III :
MODELISATION ET
SIMULATION DU
PROCEDE
EAU/GLYCOL

III.1. Introduction :

Quand une usine de traitement est simulée avec les programmes de simulation de processus, il y a plusieurs choses qui doivent être pris en compte. Cela inclut les paramètres pour le programme de simulation, la conception et les paramètres pour l'usine de traitement. Lorsque la simulation est créée des problèmes pourraient apparaître, parce que les variables doit être défini.

III.2. Simulation:

Les calculs thermodynamiques ne peuvent décrire les transformations thermodynamiques qui prennent place à l'intérieur des éléments du processus. Il est donc nécessaire d'avoir certaines équations qui décrivent les différents processus dans la simulation.

C'est ainsi qu'il est nécessaire de savoir qu'elles données d'entrée et de sortie sont exigées par la simulation.

Dans cette section tout sera montré pour une simulation du mélange Eau/Glycol, ainsi que certains problèmes associés à la simulation du processus de déshydratation du glycol seront illustrés.

III.2.1. Élément de maillage:

Pour la simulation du processus les constituants individuels dans l'usine doivent être décrits par l'élément de simulation. La description doit contenir l'information globale sur l'élément ; Ceci est illustré par la Figure III.1.

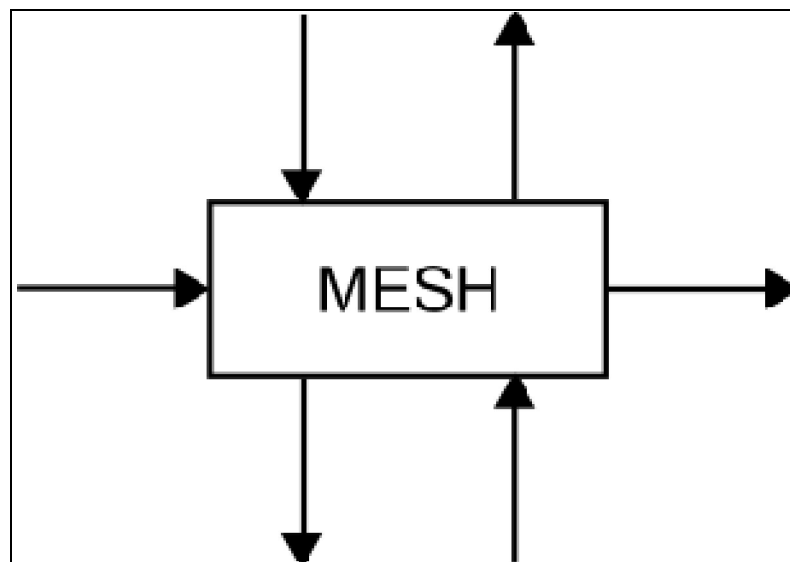


Figure III.1: Élément de maillage.

Le schéma de la Figure III.1 montre une combinaison possible vers et depuis un élément, des courants peuvent être ajoutés ou supprimés pour s'adapter à l'équipement du processus décrit.

Différents éléments peuvent ensuite être raccordés dans l'usine du processus décrit.

L'équipement du processus complexe comme les colonnes est décrit par un élément de maillage, plateau théorique (ou réel), plus la chaudière et le condenseur si ces éléments sont reliés.

Le schéma global de l'élément lui-même est une idée généralisée de ce qui entre et sort de l'élément.

La partie principale de l'élément est l'ensemble des équations à l'intérieur de cet élément. MESH est une abréviation de quatre catégories de calculs, ils sont :

- M: bilan matières
- E: équilibre
- S: sommation
- H: enthalpie (énergie)

Les équations présentes dans le maillage des éléments peuvent varier selon les variables où ils sont définis.

Les variables de la maille sont :

- Pression
- Température
- Flux
- Fraction molaire
- Flux de chaleur

Certains variables définis de l'élément sont excluent du maillage, dans ce cas les éléments ne sont pas des éléments réels du maillage. Des exemples de tels éléments sont des unités de processus avec une seule phase et donc aucun calcul d'équilibre.

Les différents types de calculs seront décrits plus en détail dans ce qui suit.

III.2.1.1. Bilan de matière:

Les bilans de matière assurent la conservation de la masse. Ceci est important parce que la masse est ni détruite ni créée, seulement redistribuée, comme décrit par:

$$\text{Entrée} + \text{Production} = \text{sortie} + \text{Accumulation} \quad \text{III.1}$$

Le bilan matière dans (III.1) comprend en général, le terme d'accumulation qui ne s'applique que pour le processus dépendant du temps, alors que le terme de production (ou consommation) ne s'applique qu'en cas d'une réaction chimique. Pour un état d'équilibre (non-réaction) le bilan matières devient la suite:

$$\text{Entrée} = \text{sortie} \quad \text{III.2}$$

III.2.1.2. Equilibre:

Dans les systèmes polyphasés il y aura équilibre entre les constituants individuels entre les différentes phases. Cela signifie que la composition de la phase dépend de la phase équilibre des espèces chimiques. A l'équilibre les fugacités des constituants sont égaux pour toutes les phases:

$$f_i^I = f_i^{II} = f_i^{III} = \dots \quad \text{III.3}$$

De la définition du coefficient de fugacité décrit en 4, la constante d'équilibre K peut être calculé à partir du coefficient de fugacité pour les différentes phases comme démontré dans l'équation suivante:

$$k_i = \frac{y_i}{x_i} = \frac{\phi_i^l}{\phi_i^v} \quad \text{III.4}$$

Le calcul d'équilibre est important pour le calcul du point de rosé, point de bulle et le calcul du flash.

Dans le calcul des phases en équilibre, c'est une exigence qu'il y a suffisamment de temps pour atteindre l'équilibre, Si ce n'est pas le cas, que cela doit être incorporé dans les calculs.

Le coefficient de fugacité des différentes espèces est calculé pour chaque phase.

Dans les colonnes l'équilibre doit être atteint sur tous les plateaux avant que l'équilibre global soit atteint.

Le calcul d'équilibre devient toujours plus compliqué, si le système contient plus de deux phases.

III.2.1.3. Sommation:

La règle de sommation n'est valide que si les compositions sont calculées en fraction molaire.

L'équation de la somme est donnée par:

$$\sum_i x_i = 1 \quad \text{III.5}$$

Il y a une équation de sommation pour chaque phase.

Les équations de sommation sont importantes parce que la composition des différentes phases change souvent dans les calculs d'équilibre.

III.2.1.4. Enthalpie:

La connexion entre l'énergie et de travail sont décrites par l'enthalpie (H), la définition de l'enthalpie est donnée comme suite:

$$H = U + pV \quad \text{III.6}$$

Où u est l'énergie interne et décrit par :

$$\Delta U = Q + W \quad \text{III.7}$$

Ici Q est énergie thermique supplémentaire et w est le travail effectué sur le système. Cela signifie que le changement d'enthalpie s'y est ajouté ou supprimé de chaleur ou du travail est fait sur ou par le système avec les changements de la pression ou de volume.

Enthalpie est une fonction d'État, la différence d'enthalpie dépendre uniquement de l'état de début et de fin pas la route.

L'enthalpie est également utilisée pour exprimer l'énergie consommée ou libérée dans une réaction chimique.

III.2.2. Séparation flash:

La séparation flash est utilisée pour calculer la composition de la phase pour un système multiphasique où seulement la composition globale des constituants est connue. De plus les équations de la thermodynamique permettent de calculer le comportement de la phase des constituants, il existe deux algorithmes utilisés pour calculer la distribution des compositions dans les phases.

La distribution des compositions dans les différentes phases est calculée à l'aide de l'algorithme de Rachford-Rice pour les systèmes à deux phases, tandis que les systèmes tri-phasiques sont calculés avec l'algorithme de Henley-Rosen.

III.2.2.1. Rachford-Rice:

L'algorithme de Rachford-Rice est utilisé pour résoudre les séparations flash en deux phases, c'est généralement la séparation de la vapeur/liquide, bien qu'il est aussi utile pour les séparations liquide/liquide.

Ici la forme classique de l'algorithme de calcul de l'équilibre vapeur/liquide va être démontrée, pour le calcul liquide/liquide la phase vapeur est remplacée par la phase liquide. Dans un système à deux phases, le bilan global est donné par:

$$F = V + L \quad \text{III.8}$$

Où F est le flux total dans le système, V est le débit de vapeur et L est le flux de liquide hors du système.

Pour les constituants individuels, le bilan de masse est donné par:

$$F \cdot z_i = V \cdot y_i + L \cdot x_i \quad \text{III.9}$$

La fraction de vapeur ψ doit être comprise entre zéro et un, elle est donnée par:

$$\psi = \frac{V}{F} \quad \text{III.10}$$

La taille totale de la phase de vapeur et la phase de liquide est donnée respectivement par (III.11) et (III.12):

$$V = \psi \cdot F \quad \text{III.11}$$

$$L = (1 - \psi) \cdot F \quad \text{III.12}$$

À l'équilibre les relations entre les compositions dans les deux phases sont donnés par les constantes d'équilibres k_i comme suit:

$$y_i = K_i \cdot x_i \quad \text{III.13}$$

Par l'insertion de (III.11), (III.12) et (III.13) dans (III.9) et après la réorganisation on obtient la formule suivante:

$$x_i = \frac{Z_i}{1 + \psi(K_i - 1)} \quad \text{III.14}$$

L'équation de Rachford-Rice est basée sur la règle de sommation (III.5). Rachford-rice combine la sommation pour les deux phases en:

$$\sum_i x_i - \sum_i y_i = 0 \quad \text{III.15}$$

Par l'insertion de (III.13) et (III.14) dans (III.15), l'équation de Rachford-rice devient :

$$\sum_i \frac{Z_i(1-K_i)}{1 + \psi(K_i - 1)} = 0 \quad \text{III.16}$$

L'équation de Rachford-Rice est utilisée pour calculer ψ ; Cela peut être fait par un processus itératif en utilisant la méthode de Newton-Raphson.

L'algorithme de Rachford-Rice:

L'algorithme de Rachford-Rice est un algorithme de calcul du flash pour deux phases où leur équation est utilisée pour résoudre l'équilibre vapeur/liquide.

Dans l'algorithme de Rachford-Rice les compositions dans le système doivent être données avec quelques estimations initiales pour K_i et Ψ . Ces estimations initiales sont alors la mise à jour de l'algorithme dans un processus itératif, l'algorithme est illustré dans la Figure III.2.

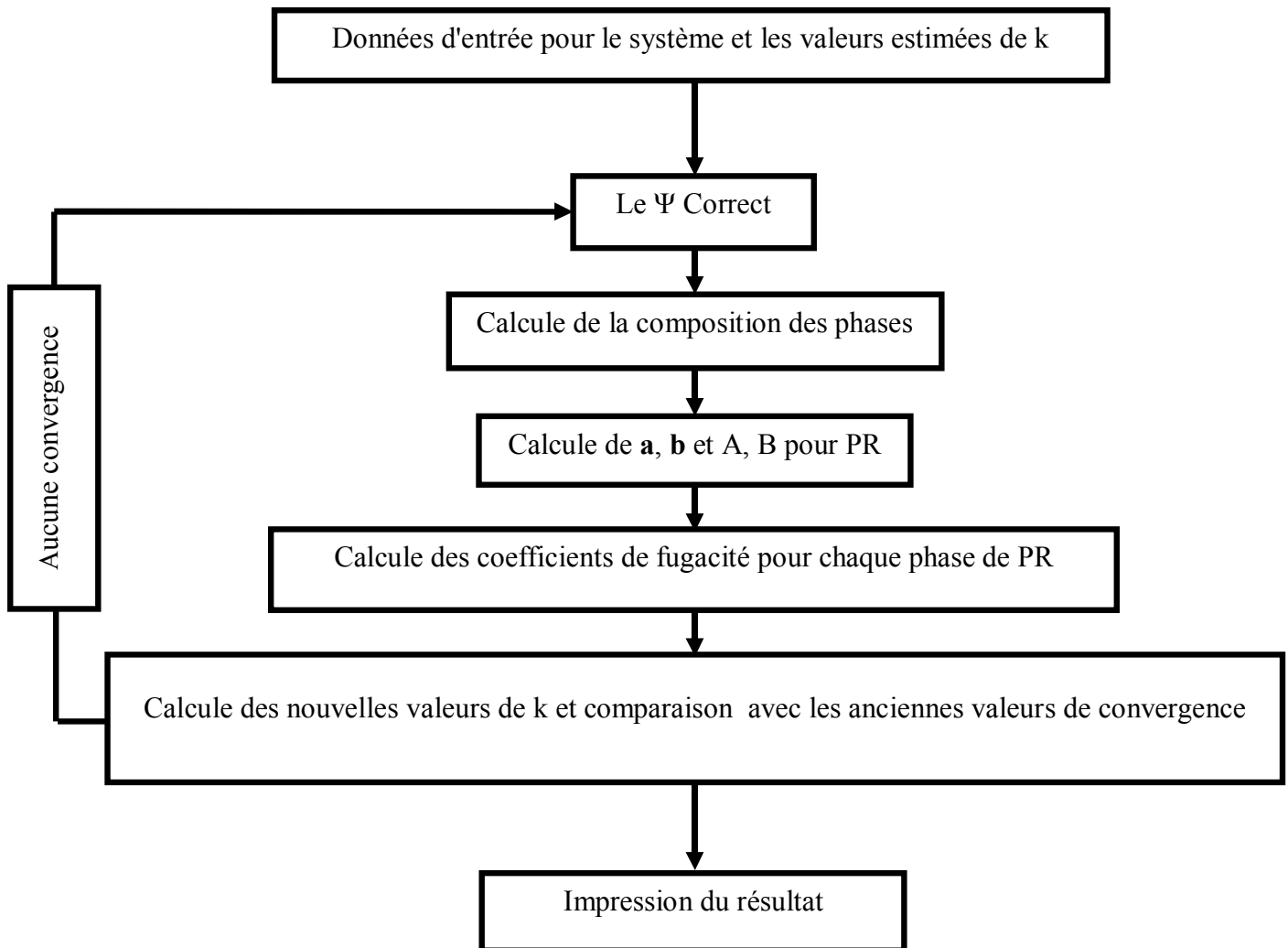


Figure III.2: Algorithme de Rachford-Rice.

III.2.2.2. Henley-Rosen:

L'algorithme de Henley-Rosen est similaire à l'algorithme Rachford-Rice seulement celui de Henley-Rosen résout les séparations flash de trois phases. Le calcul du flash pour trois phases donne le bilan massique global suivant:

$$F = V + L_1 + L_2 \quad \text{III.17}$$

En raison de la phase supplémentaire, la fraction liquide/liquide ξ est introduite parallèlement à la fraction de vapeur ψ . Elles sont définies comme suit par:

$$\psi = \frac{V}{F} \quad \text{III.18}$$

$$\xi = \frac{L_1}{L_1 + L_2} \quad \text{III.19}$$

Il y a une constante d'équilibre supplémentaire définies par:

$$K_i^1 = \frac{y_i}{x_i^1} \quad \text{III.20}$$

$$K_i^2 = \frac{y_i}{x_i^2} \quad \text{III.21}$$

La composition des trois phases peut être calculée par:

$$y_i = \frac{Z_i}{\frac{\xi(1-\psi)}{K_i^1} + \frac{(1-\psi)(1-\xi)}{K_i^2} + \psi} \quad \text{III.22}$$

$$x_i^1 = \frac{Z_i}{\xi(1-\psi) + (1-\psi)(1-\xi) \left[\frac{K_i^1}{K_i^2} \right] + \psi K_i^1} \quad \text{III.23}$$

$$x_i^2 = \frac{Z_i}{\xi(1-\psi) \left[\frac{K_i^1}{K_i^2} \right] + (1-\psi)(1-\xi) + \psi K_i^2} \quad \text{III.24}$$

Au lieu de résoudre (III.22), (III.23) et (III.24), deux des équations peut être remplacé par (III.20) et (III.21).

Parce qu'il y a deux inconnues ψ et ξ , il y a deux équations de Henley-Rosen:

$$\sum_i \frac{Z_i(1-K_i^1)}{\xi(1-\psi)+(1-\psi)(1-\xi)\left[\frac{K_i^1}{K_i^2}\right]+\psi K_i^1} = 0 \quad \text{III.25}$$

$$\sum_i \frac{Z_i \left[1 - \frac{K_i^1}{K_i^2}\right]}{\xi(1-\psi)+(1-\psi)(1-\xi)\frac{K_i^1}{K_i^2}+\psi K_i^1} = 0 \quad \text{III.26}$$

Les deux équations de Henley-Rosen doivent être résolues simultanément par une méthode appropriée comme celle de Newton-Raphson pour un système à deux inconnus.

Algorithme de Henley-Rosen :

L'algorithme de Henley-Rosen est similaire à l'algorithme de Rachford-Rice, la seule différence est que les valeurs initiales de K_i^1, K_i^2 , et ξ doivent être données. Dans l'algorithme ψ et ξ sont simultanément mises à jour, comme K_i^1 et K_i^2 . Sinon, l'algorithme est identique à celui de la Figure III.2.

III.2.3. Modèle de Simulation:

Dans la nature l'eau et Glycol se mélangent et créent une phase unique Eau/Glycol, en raison de l'attraction polaire entre les constituants. Ce mélange est difficile à simuler à cause de l'interaction polaire entre l'eau et le Glycol. Le but de la simulation est d'étudier la capacité des équations thermodynamiques pour simuler le mélange Eau/Glycol correctement.

Dans le cas où les équations thermodynamiques ne peuvent pas reproduire le mélange, le résultat sera une solution de deux phases liquide. Donc, les calculs sont effectués comme le calcul flash, à l'aide de l'algorithme de Rachford-Rice. L'algorithme exige deux phases à tout moment, sinon, il ne marche pas.

Pour assurer que les deux phases liquides sont toujours présentes, les constituants comprennent le Décane en plus de l'eau et le Glycol. Le Décane crée une phase liquide stable en raison de sa faible tendance à s'évaporer.

Le mélange eau/Glycol est également simulé dans un système tri-phasique à l'aide de l'algorithme de Henley -Rosen.

Les calculs flash des trois phases sont effectués pour évaluer la tendance des constituants à s'évaporer, et son influence concernant les calculs en deux phases.

Dans les calculs tri-phasiques, le Méthane est ajouté au système pour créer une phase gazeuse permanente.

En plus de l'étude de l'équilibre de l'Eau/Glycol dans les systèmes des deux phases et trois phases, l'équilibre est étudié avec trois équations d'états différents. C'est PR, PRSV et PR avec la règle de mélange de Wong-Sandler (PR-WS). Cela crée un total de six cas différents ; ils sont décrits dans le tableau III.1.

Tableau III.1 : Les différents cas d'étude.

Equations d'état	Flash en deux phases	Flash en trois phases
PR	Cas 1	Cas 4
PRSV	Cas 2	Cas 5
PR-WS	Cas 3	Cas 6

L'étude dans les six cas est effectuée dans les mêmes conditions de fonctionnement et pour les mêmes constituants, selon les phases nécessaires.

III.2.3.1. Données d'entrée:**Les conditions d'exploitation :**

Conditions requises pour le système d'exploitation sont limitées aux valeurs de la température et la pression suivantes :

Température : 25 °C

Pression : 0 bar

Composition :

Les constituants utilisés diffèrent entre deux et trois phases du calcul. Le système bi-phasique est constitué d'eau, Glycol et Décane. En raison de la phase supplémentaire dans le calcul de trois phases, le Méthane est ajouté pour créer la phase gazeuse.

Avec les constituants déterminés, la prochaine étape est de déterminer la composition des constituants dans le flux entrant. Parce que l'eau et le Glycol sont les principaux constituants, ceux-ci sont déterminés en premier et le reste des constituants seront ajoutés pour atteindre un débit total d'une mole dans le système.

Dans l'usine de déshydratation de Glycol, le flux de TEG est compris entre 0,017 et 0,042 m³ et pauvre en TEG/kg, l'eau dans le gaz (varie de 2 à 5 lb/gal), selon la taille et l'efficacité de la colonne; les données pour les calculs sont données dans le tableau II.1.

La composition de l'écoulement dans le système est donnée dans le tableau III.2.

Tableau III.2 : Données du flux entrant pour la simulation.

Constituants	Flash en deux phases [mol]	Flash en trois phases [mol]
Eau	0.10	0.10
TEGlycol	0.34	0.34
Méthane	0.00	0.20
Décane	0.56	0.36

D'après le tableau III.2 on peut constater que le débit dans le système est d'une mole.

III.2.3.2. Le Logiciel MATLAB:

Pour la description du programme, on l'a divisé le plusieurs partie. Tout d'abord le programme PR pour deux phases avec explication et puis les modifications faites pour PRSV, règle de mélange de Wong-Sandler et l'algorithme à trois phases.

Données d'entrée :

La première partie du programme est dédiée pour les variables globales. La variable globale est nécessaire lorsque plusieurs scripts partagent les mêmes variables et ceci est illustré dans la Figure III.3.

En outre, les variables globales de la Figure III.3 contiennent également les données d'entrée pour un seul constituant. Le code pour les autres constituants est semblable au code du constituant de la Figure III.3, la seule différence existe dans les valeurs spécifiques du constituant.

```

global C; %Number of components
C=3;
global R; %The Gas Constant
R=8.314; %[J/(mol*K)]
global pc; %Critical pressure [pa]
global Tc; %Critical temperature [K]
global omega; %Acentric factor
%---- Critical data for components ----
%Data is from HYSYS critical component data database - K-values are
guessed
for c=1 %Water
Tc(c)=647.25; %Critical Temperature [K]
pc(c)=22.12e6; %Critical Pressure [Pa]
omega(c)=0.344; %Acentric factor
K(c)=1.439e-2; %Water in water
End

```

Figure III.3: Le code MATLAB pour les variables globales et les données critiques.

Les données requises pour résoudre le programme comprend également la pression et la température pour la séparation et la composition de l'écoulement dans le système. Le code pour cela est donné dans la Figure III.4.

```

Tflash=25; %Temp in [C]
T=Tflash+273.15; %Temp in [K]
pflash=0.0; %Pressure in [barg]
p=(1+pflash)*1e5; %Pressure in [Pa]
%Composition [mol]
z(1)=0.10; %Water
z(2)=0.34; %TEG
z(3)=0.56; %Decane
%Normalizing for z-values
zsum=0;
for c=1:C
zsum=zsum+z(c);
end
for c=1:C
z(c)=z(c)/zsum;
end

```

Figure III.4: Données d'entrée pour le MATLAB.

Parce que dans le MATLAB les calculs sont effectués sur la base de fraction molaire, la somme des constituants de l'écoulement dans le système doit être égale à 1. Pour cela, les valeurs de z sont normalisées. Le code de la Figure III.4 contient également une estimation initiale pour les fractions des phases liquide-liquide. Cela est nécessaire, avant de mettre à jour la valeur dans l'équation de Rachford-Rice.

Séparation des phases:

La première étape de l'algorithme est de mettre à jour la fraction de phase ψ , cela se fait avec l'équation de Rachford-Rice à l'aide de la méthode de Newton-Raphson. Ceci est illustré dans la Figure III.5.

```

error=1;
mb=0;
MB=100;
while error > 1e-6
f=0;
fdot=0;
for c=1:C
f=f+z(c)*(1-K(c))/(1+psi*(K(c)-1));
fdot=fdot+z(c)*(K(c)-1)^2/(psi*(K(c)-1)+1)^2;
end
psi=psi-f/fdot;
if psi<0 || psi>1
disp('New initial value for psi')
fprintf('psi %.4f\n',psi)
return
end
error = abs(f);
mb=mb+1;
if mb>=MB
disp('max no. of iterations in loop b')
return
end

```

Figure III.5: Calcul de fractions des phases.

Composition de la phase:

La composition de la phase est calculée à partir du flux dans le système avec la la fraction de la nouvelle phase. En plus de la fraction de phase, les calculs de composition de phase exige également la valeur de la constante d'équilibre k . Les calculs sont présentés dans la Figure III.6.

```

for c=1:C
x(1,c)=z(c)/(1+psi*(K(c)-1));
x(2,c)=K(c)*x(1,c);
end

```

Figure III.6: Calcul de la composition de la phase.

Calculs de la fugacité:

Les calculs de fugacité sont menées avec PR, la première étape consiste à calculer **a** et **b** pour les constituants individuels, ceci est illustré dans la Figure III.7.

```
%----- a et b dans Peng-Robinson -----
for c=1:C
kappa=0.37464+1.54226*omega(c)-0.26992*omega(c)^2;
alfa=(1+kappa*(1-sqrt(T/Tc(c))))^2;
a(c,c)=0.45724*R^2*Tc(c)^2/pc(c)*alfa;
b(c)=0.07780*R*Tc(c)/pc(c);
end
for c=2:C
for n=1:(c-1)
a(c,n)=sqrt(a(c,c)*a(n,n));
a(n,c)=a(c,n);
end
end
```

Figure III.7: Calcul de a et b pour PR.

En plus du calcul des valeurs de **a** pour les constituants purs, il est également nécessaire de calculer les valeurs de **a** pour l'interaction entre les constituants.

Les valeurs de **a** et **b** sont nécessaires pour le calcul de **a_m**, **b_m**, **A** et **B**. Ces calculs sont effectués pour chaque phase, comme illustré à la Figure III.8.

```
am=0;
bm=0;
for c=1:C
for n=1:C
am=am+x(1,c)*x(1,n)*a(c,n);
end
bm=bm+x(1,c)*b(c);
end
A=am*p/(R*T)^2;
B=bm*p/(R*T);
```

Figure III.8: Calcul de a_m, b_m, A et B.

Lorsque les valeurs de **a** et **b** pour la phase sont calculées, elles sont insérées dans l'équation cubique PR, donc cela peut être résolu. Ceci est illustré dans la Figure III.9.

```
Z1=B;
error=1;
mc=0;
MC=100;
while error > 1e-6
g=Z1^3+(-1+B)*Z1^2+(A-3*B^2-2*B)*Z1+(-A*B+B^2+B^3);
gdot=3*Z1^2+2*(-1+B)*Z1+(A-3*B^2-2*B);
Z1=Z1-g/gdot;
error=abs(g);
mc=mc+1;
if mc>=MC
```

```

disp('max no. of iterations in loop c')
return
end
end

```

Figure III.9: Calcul de Z avec PR.

La valeur de Z pour la phase est utilisée pour le calcul de la fugacité de la Figure III.10.

```

for c=1:C
xa=0;
for n=1:C
xa=xa+x(1,n)*a(c,n);
end
phi(1,c)=exp(b(c)/bm*(Z1-1)-log(Z1-bm*p/(R*T))-...
am/(2*sqrt(2)*bm*R*T)*(2*xa/am-b(c)/bm)*...
log((Z1+(1+sqrt(2))*bm*p/(R*T))/(Z1+(1-sqrt(2))*bm*p/(R*T))));
end

```

Figure III.10: Calcul du coefficient de fugacité.

Modification de PRSV:

Lorsque le programme est exécuté avec PRSV, le programme décrit doit être modifié légèrement. Dans les données critiques pour les constituants, la valeur de κ_1 doit être ajoutée. L'autre différence est le calcul de valeur de **a** pour les constituants purs, les nouveaux calculs sont indiqués dans la Figure III.11.

```

%----- a et b dans PRSV -----
for c=1:C
Tr=T/Tc(c);
kappa0=0.378893+1.4897153*omega(c)+...
0.17131848*omega(c)^2+0.0196554*omega(c)^3;
kappa=kappa0+kappa1(c)*(1+sqrt(Tr))*(0.7-Tr);
alfa=(1+kappa*(1-sqrt(T/Tc(c))))^2;
a(c,c)=0.45724*R^2*Tc(c)^2/pc(c)*alfa;
b(c)=0.07780*R*Tc(c)/pc(c);
end

```

Figure III.11: Calcul de a et b avec PRSV.

Modification de Wong-Sandler

La règle de mélange Wong-Sandler peut être utilisée au lieu d'une seule règle de mélange d'un seul fluide de van der Waals pour les différents équations d'état ; ici elle est combiné avec PR. La première différence quand la modification Wong-Sandler est introduite dans le calcul de l'interaction entre les constituants, cela est montré dans la Figure III-12.

```

%---- a et b dans Peng-Robinson ----
for c=1:C
kappa=0.37464+1.54226*omega(c)-0.26992*omega(c)^2;
alfa=(1+kappa*(1-sqrt(T/Tc(c))))^2;
a(c,c)=0.45724*R^2*Tc(c)^2/pc(c)*alfa;
b(c,c)=0.07780*R*Tc(c)/pc(c);
end
for c=1:C
for n=1:C
cross(c,n)=1/2*(b(c,c)+b(n,n))-sqrt(a(c,c)*a(n,n))/(R*T);
end
end

```

Figure III.12: Calcul de a, b et le terme de Wong-Sandler.

Wong-Sandler change également le calcul de a_m et b_m , le nouveau calcul est effectué par l'intermédiaire de deux valeurs Q et D. Ces nouveaux calculs sont donnés dans la Figure III.13.

```

Q=0;
Dsum=0;
for c=1:C
for n=1:C
Q=Q+x(1,c)*x(1,n)*cross(c,n);
end
Dsum=Dsum+x(1,c)*(a(c,c)/(b(c,c)*R*T));
end
D=Dsum+Gex/(Cstar*R*T);
am=Q*D/(1-D)*R*T;
bm=Q/(1-D);

```

Figure III.13: Calcul de Q, D, am et bm avec Wong-Sandler.

L'introduction de la règle de mélange de Wong-Sandler change aussi le calcul du coefficient de fugacité, comme illustré dans la Figure III.14

```

% --- Coefficients de fugacité ---
for c=1:C
fug(4,c)=(a(c,c)/(b(c,c)*R*T)+(log(gamma(c))/Cstar);
fusum=0;
for n=1:C
fusum=fusum+x(1,n)*cross(c,n);
end
fug(3,c)=2*fusum;
fug(1,c)=1/(1-D)*fug(3,c)-Q/(1-D)^2*(1-fug(4,c));
fug(2,c)=R*T*D*fug(1,c)+R*T*bm*fug(4,c);
phi(1,c)=exp(1/bm*fug(1,c)*(Z-1)-log(Z-B)+...
am/(2*sqrt(2)*bm*R*T)*(1/am*fug(2,c)-1/bm*fug(1,c))*...
log((Z+(1+sqrt(2))*B)/(Z+(1-sqrt(2))*B)));
end

```

Figure III.14: Calcul du coefficient de fugacité pour Wong-Sandler.

Le nouveau calcul de coefficient de fugacité pour Wong-Sandler dépend de quatre dérivés, sont nommés de fug(1,c) à fug(4,c).

Modification des trois phases:

La principale modification entre les programmes des deux et trois phases, est que le calcul des fractions de la phase ψ et ξ dans le programme de trois phases contient une phase supplémentaire, une valeur supplémentaire de k est requise pour chaque constituant pour les données critiques.

Les fractions de trois phases sont également calculées avec la méthode de Newton-Raphson, cette fois la variante est à deux équations et à deux inconnues. Cela donne deux équations de Newton-Raphson qui reposent sur deux équations et quatre dérivés, comparés à une équation à une dérivée et à une seule inconnue.

Le calcul des fractions de phases pour le programme de trois phases est donné dans la Figure III.15.

```

%---- Calculs du psi et xi ----
error=1;
mb=0;
MB=100;
while error > 1e-6 && mb<MB
f(1)=0;
for c=1:C
f(1)=f(1)+z(c)*(1-K(1,c))/...
(xi*(1-psi)+(1-xi)*(1-psi)*K(1,c)/K(2,c)+psi*K(1,c));
end
for c=1:C
fdot(1,1)=fdot(1,1)-z(c)*(1-K(1,c))*...
(-xi-(1-xi)*K(1,c)/K(2,c)+K(1,c))/...
(xi*(1-psi)+(1-xi)*(1-psi)*K(1,c)/K(2,c)+...
psi*K(1,c))^2;
end
%som de fdot(1,2), fdot(1,2)=d(f(1))/d(xi)
%som de fdot(2,1), fdot(2,1)=d(f(2))/d(psi)
%som de fdot(2,2), fdot(2,2)=d(f(2))/d(xi)
% équation de Newton Raphson pour 2 équations et 2 inconnues
psi=psi-(f(1)*fdot(2,2)-f(2)*fdot(1,2))/...
(fdot(1,1)*fdot(2,2)-fdot(1,2)*fdot(2,1));
xi=xi-(fdot(1,1)*f(2)-fdot(2,1)*f(1))/...
(fdot(1,1)*fdot(2,2)-fdot(1,2)*fdot(2,1));
if psi<0 || psi >1 || xi<0 || xi>1
disp('new initial values for xi or psi')
fprintf('Vapor-Liquid split (psi) %.4f\n',psi);
fprintf('Oil-Water split (xi) %.4f\n',xi);
return
end
error=abs(f(1))+abs(f(2));
mb=mb+1;
if mb>=MB
disp('max no. iterations for loop b')
end
end

```

Figure III.15: Calcul des fractions pour trois phases.

III.2.4. Résultat de la simulation:

Le résultat des six cas étudiés est donné dans les sections suivantes. Le résultat contient la composition de la phase, les flux molaires et le pourcentage molaire, avec la taille totale des phases. Les résultats contiennent également les constantes d'équilibre et les fractions des phases.

Commentaire et comparaison des résultats avec les cas précédents.

III.2.4.1. Cas 1 :

Dans le cas 1, PR est utilisé avec l'algorithme de Rachford-Rice, le système se compose de trois éléments, l'Eau, TEG et Décane. Les résultats du cas 1 sont donnés dans le tableau III.3.

Tableau III.3 : Composition des phases dans le Cas 1.

	Phase d'eau		Phase d'huile		K
	[mol %]	[mol]	[mol %]	[mol]	
Eau	100.00	0.087	1.44	0.013	$1.44 \cdot 10^{-2}$
Glycol	0.00	0.000	37.23	0.340	$4.99 \cdot 10^{-39}$
Décane	0.00	0.000	61.33	0.560	$1.28 \cdot 10^{-21}$
Total	100.00	0.087	100.00	0.913	-

III.2.4.2. Cas 2 :

Dans le cas 2, PRSV est utilisé avec l'algorithme de Rachford-Rice, le système se compose de trois éléments, l'Eau, TEG et Décane. Les résultats du cas 2 sont donnés dans le tableau III.4.

Tableau III.4 : Composition des phases dans le Cas 2.

	Phase d'eau		Phase d'huile		K
	[mol %]	[mol]	[mol %]	[mol]	
Eau	100.00	0.083	1.90	0.013	$1.89 \cdot 10^{-2}$
Glycol	0.00	0.000	37.06	0.340	$9.40 \cdot 10^{-34}$
Décane	0.00	0.000	61.04	0.560	$4.97 \cdot 10^{-20}$
Total	100.00	0.083	100.00	0.913	-

III.2.4.3. Cas 3 :

Dans le cas 3, PR-WS est utilisé avec l'algorithme de Rachford-Rice, le système se compose de trois éléments, l'Eau, TEG et Décane.

L'idée de l'utilisation de la règle du mélange de Wong-Sandler était pour atteindre un résultat plus précis pour le mélange Eau/Glycol. Malheureusement, ce programme a été incapable d'arriver à un résultat, donc ce cas il a été divisé en 6 sous-cas utilisés pour étudier le problème avec ce code.

Cas 3a :

Les valeurs de ψ et k en fonction de l'itération sont données dans le tableau III.5.

Tableau III.5 : valeurs de ψ et K dans le cas 3a.

Itération	ψ	K(Eau)	K(Glycol)	K(Décane)
Début	0.917	$1.89.10^{-2}$	$9.40.10^{34}$	$4.97.10^{20}$
1	0.917	$2.18.10^0$	$7.76.10^{-3}$	$1.07.10^{-1}$
2	-0.655	-	-	-

Cas 3b :

Les résultats du cas b3 sont donnés dans le tableau III.6.

Tableau III.6 : valeurs de ψ et K dans le cas 3b.

Itération	ψ	K(Eau)	K(Glycol)	K(Décane)
Début	0.500	$1.89.10^{-2}$	$9.40.10^3$	$4.97.10^{20}$
1	0.917	$2.18.10^0$	$7.90.10^{-3}$	$1.08.10^{-1}$
2	-0.655	-	-	-

Cas 3c :

Les estimations initiales pour les valeurs de K ont été modifiées par rapport à 1, ce qui est illustré dans le tableau III.7

Tableau III.7 : valeurs de ψ et K dans le cas 3c.

Itération	ψ	K(Eau)	K(Glycol)	K(Décane)
Début	0.83	$1.89.10^{-2}$	$9.40.10^3$	$4.97.10^{20}$
1	0.099	$4.54.10^{-1}$	$8.07.10^1$	$1.08.10^{-1}$
2	3036900.449	-	-	-

Cas 3d :

L'énergie d'excès de Gibbs est mis à 0 et le coefficient d'activité des constituants est 1. Le flux dans le système est égal à des quantités d'eau et le Décane. Cela donne une simple simulation, les résultats sont donnés dans le tableau III.8

Tableau III.8 : Valeurs de ψ et K dans le cas 3d.

Itération	ψ	K(Eau)	K(Décane)
Début	0.500	$1.89.10^{-2}$	$4.97.10^2$
1	0.509	$4.54.10^{-1}$	$1.53.10^{-1}$
2	0.224	$6.18.10^{-1}$	3.2810^0
3	1.089	=	=

Cas 3e :**Tableau III.9 : Données de l'équation d'état dans le cas 3e.**

			PR	PR-WS
Phase 1	A^m		14.717	14.609
	b^m		$2.40.10^{-4}$	$2.36.10^{-4}$
	φ	Eau Glycol Décane	$2.69.10^{-2}$ $2.24.10^{34}$ $2.72.10^{18}$	$4.29.10^8$ $1.99.10^{10}$ $1.14.10^8$
Phase 2	A^m		0987	0.982
	b^m		$1.89.10^{-5}$	$1.89.10^{-5}$
	φ	Eau Glycol Décane	$1.87.10^0$ $4.50.10^{-6}$ $2.13.10^{-3}$	$9.35.10^8$ $1.57.10^8$ $1.23.10^7$
K		Eau Glycol Décane	$1.44.10^{-2}$ $4.99.10^{39}$ $1.28.10^{21}$	$2.18.10^0$ $7.90.10^{-3}$ $1.08.10^{-1}$

Cas 3f :**Tableau III.10 : valeurs de ψ et K dans le cas 3f.**

Itération	ψ	K(Eau)	K(Décane)	K(Méthane)
Début	0.660	$1.89.10^{-2}$	$4.97.10^2$	$1.90.10^2$
1	0.678	$5.07.10^{-8}$	$1.18.10^7$	$2.85.10^4$
2	2845130.341	-	-	-

III.2.4.4. Cas 4

Dans le cas 4, PR est utilisé avec l'algorithme de Henley-Rosen pour un système à quatre constituants contenant de l'eau, le Méthane, le TEG et le Décane. Les résultats du cas 4 sont donnés dans le tableau III.11.

Tableau III.11 : Composition des phases dans le cas 4.

	Phase gazeuse		phase huileuse		Phase de l'eau		K1	K2
	[mol%]	[mol]	[mol%]	[mol]	[mol%]	[mol]		
Eau	2.71	0.005	1.40	0.010	100.00	0.085	$1.93.10^0$	$2.71.10^{-2}$
Glycol	0.00	0.000	47.61	0.340	0.00	0.00	$4.75.10^{-6}$	$2.17.10^{34}$
Méthane	97.18	0.196	0.60	0.004	0.00	0.00	$1.63.10^2$	$1.03.10^6$
Décane	0.00	0.000	50.38	0.360	0.00	0.00	$2.22.10^{-3}$	$2.817.10^{18}$
Total	100.00	0.201	100.00	0.714	100.00	0.085	-	-

III.2.4.5. Cas 5:

Dans le cas 5, PRSV est utilisée avec l'algorithme de Henley-Rosen pour un système à quatre constituants contenant de l'eau, le Méthane, le TEG et le Décane. Les résultats de la simulation du cas 5 sont donnés dans le tableau III.12.

Tableau III.12 : Composition des phases dans le cas 5.

	Phase gazeuse		phase huileuse		Phase de l'eau		K ₁	K ₂
	[mol%]	[mol]	[mol%]	[mol]	[mol%]	[mol]		
Eau	2.58	0.005	1.92	0.014	100.00	0.081	$1.34.10^0$	$2.58.10^{-2}$
Glycol	0.00	0.000	47.41	0.340	0.00	0.00	$4.91.10^{-6}$	$1.65.10^{27}$
Méthane	97.36	0.197	0.48	0.003	0.00	0.00	$2.04.10^2$	$1.24.10^6$
Décane	0.06	0.000	50.18	0.360	0.00	0.00	$1.19.10^{-3}$	$5.875.10^{17}$
Total	100.00	0.202	100.00	0.717	100.00	0.081	-	-

III.2.4.6. Cas 6 :

Tableau III.13 : Constants d'équilibre dans le cas 6.

	K ₁	K ₂
Eau	$1.87.10^7$	$4.22.10^7$
Glycol	$2.03.10^{10}$	$2.02.10^8$
Méthane	$6.63.10^2$	$3.50.10^3$
Décane	$7.75.10^7$	$9.60.10^6$

III.3. Simulation de procédé:

III.3.1. Le programme de simulation du processus :

III.3.1.1. HYSYS :

Le 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 : 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.

Le HYSYS a déjà été utilisé comme une source des données thermodynamiques utilisées dans le MATLAB.

La version de HYSYS utilisées pour les simulations est Aspen HYSYS 3.2. Les packages thermodynamiques dans HYSYS comprennent un package de Glycol spécialement conçu pour la déshydratation du TEG. Outre le package de Glycol, PR est la simulation d'équation d'état recommandée de déshydratation de TEG

III.3.2. Modélisation du procédé avec le simulateur HYSYS :

III.3.2.1. Schéma du procédé :

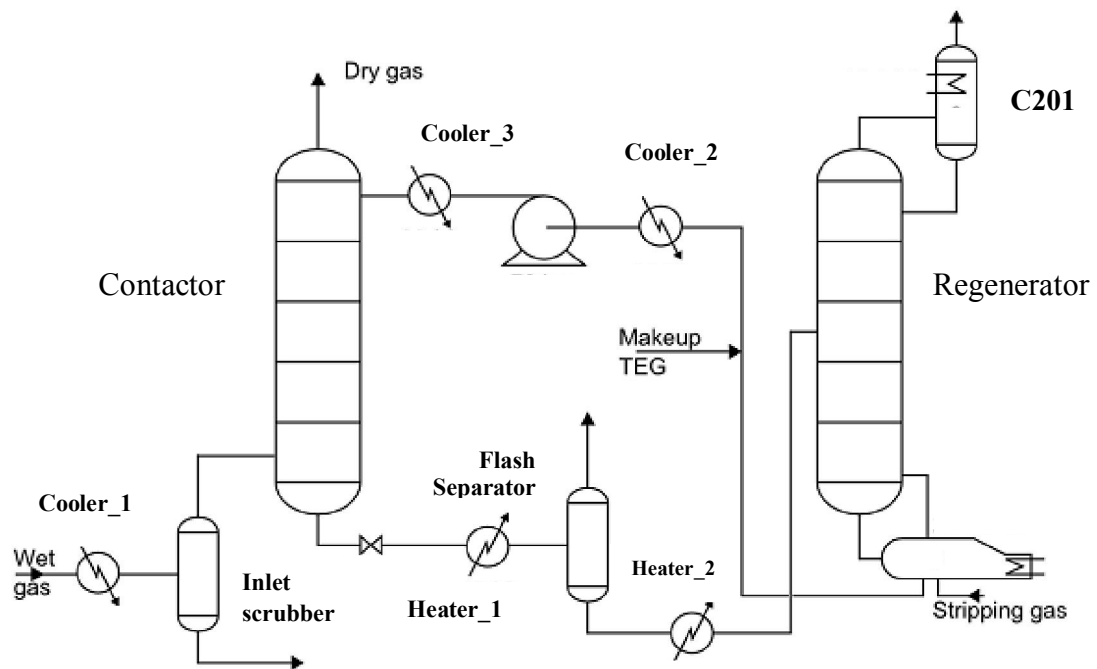


Figure III.16 : Schéma du procédé.

III.3.2.2. Schéma de simulation :

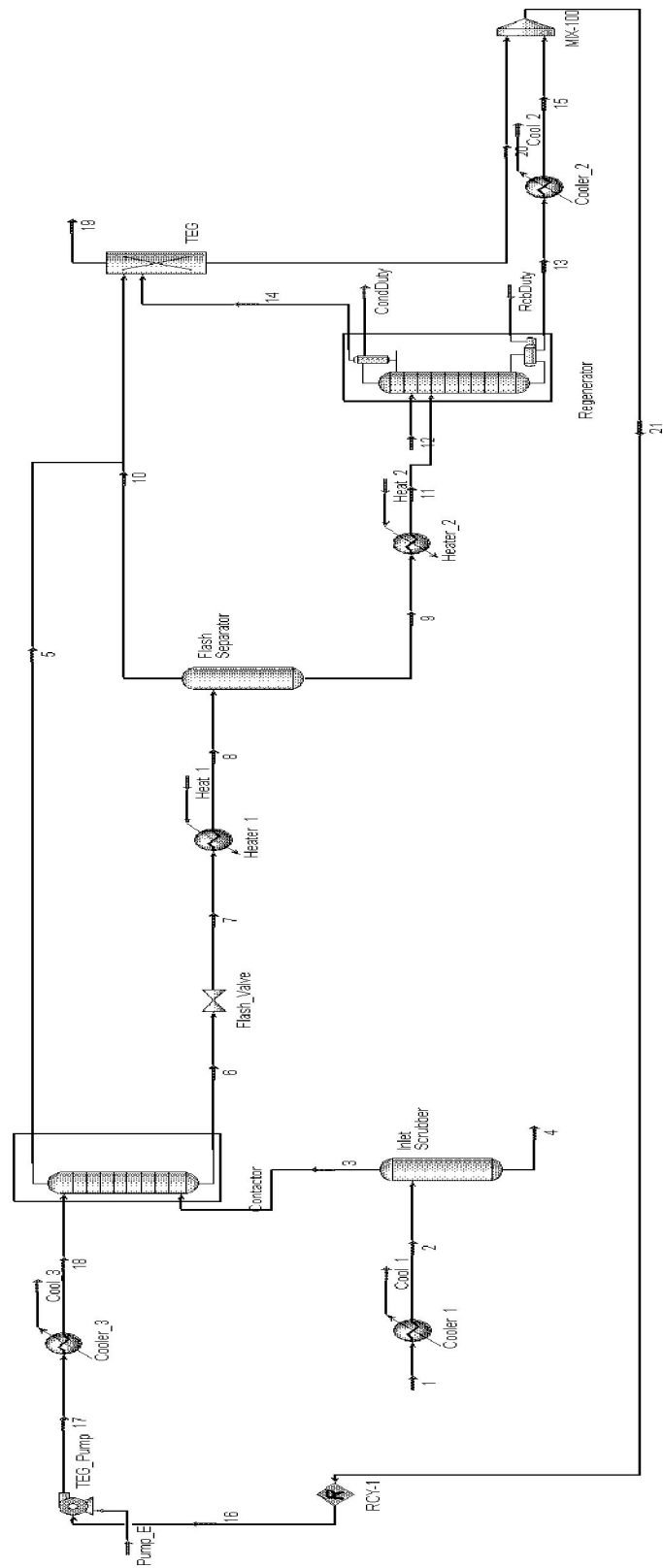


Figure III.17 : Modèle de simulation de déshydratation par HYSYS.

III.3.2.3. Présentation du procédé :

Ce procédé est le procédé « traditionnel » de déshydratation au TEG et représente une unité d'absorption de gaz et de régénération du solvant d'extraction.

Il vise à diminuer la teneur en eau dans du gaz naturel par le tri éthylène glycol (TEG), utilisé comme solvant d'extraction de l'eau.

L'eau peut provoquer la formation d'hydrates à basse température ou causer des problèmes de corrosion en présence de dioxyde de carbone ou d'hydrogène sulfuré, composés régulièrement présents dans le gaz naturel.

Le gaz humide introduit dans le refroidisseur Cooler_1 (courant 1) a été utilisé parce que la déshydratation est plus efficace à basse température.

Un autre avantage de refroidisseur Cooler_1 est que certains l'eau (et hydrocarbures) dans les gaz seront se condenser et supprimé dans l'inlet Scrubber, au lieu de dans le contacteur (contacteur).

Il est utilisé lorsque la température des gaz est plus élevée que la température désiré dans le contacteur.

Puis le gaz circule vers inlet scrubber (courant 2) qui supprime des gouttelettes de liquides, (l'eau et hydrocarbures).

Hydrocarbure liquides sont également un problème dans le contacteur car ils augmentent la tendance glycols à mousse, ce qui diminue l'efficacité de contacteurs et augmentant la perte de glycol dans Le régénérateur et du système de régénération.

Un autre problème est que peut d'hydrocarbures être accumulées dans le glycol il pollue et diminuant l'efficacité de déshydratation.

Les produits lourds décentés (hydrocarbure et l'eau) et les produits légers montent (Gaz humide).

Le gaz humide alimente le contacteur (courant 3) à une pression de 70 bar.

Cette colonne permet l'absorption d'une partie de l'eau contenue dans le gaz dans une solution de TEG.

Au terme de la boucle de régénération, le TEG sec alimente la colonne en tête (courant 18) tandis que le TEG humide est récupéré en pied de colonne (courant 6) et soutiré sous régulation de niveau où il est détendu à 1.793 bar (Flash Valve).

Il passe ensuite à travers un filtre à cartouche qui permet de retenir les particules solides pouvant provenir de corrosion ou de dégradation du TEG. Les particules solides ou la dégradation du TEG n'étant pas prises en compte dans le modèle, cette filtration n'a pas d'impact en termes de simulation et n'est donc pas représentée.

Le TEG humide passe vers l'échangeur de chaleur Heater_1 (courant 7) pour chauffer par ce que le chauffage avant le séparateur Flash Separator augmenter la récupération d'hydrocarbures avec perte de glycol.

Le TEG humide est ensuite récupéré dans le séparateur Flash Separator (courant 8).

- La phase gazeuse, le gaz dirige vers colonne C201 (courant 10) pour servir de gaz de stripping.

Cette colonne permet de diminuer la concentration en eau dans le TEG par stripping avec les vapeurs d'hydrocarbure

- La phase liquide est préchauffée dans l'échangeur de chaleur Heater_2 (courant 9) puis alimente le régénérateur (courant 11).

Cette colonne permet de vaporiser l'eau contenue dans le TEG. Elle fonctionne à pression atmosphérique. Les vapeurs de tête sont constituées de l'eau et des hydrocarbures qui étaient dissous dans le TEG et dirige vers colonne C201 (courant 14)

Le TEG sec est alors soutiré en pied (courant 15) vers le stockage MIX-100 a travers le refroidisseur Cooler_2 (courant_13) et le pied de colonne C201 alimente le stockage MIX100

Le TEG sec est ensuite repris par la pompe TEG_Pump (courant_16) vers le refroidisseur Cooler_3 (courant_17) pour alimenter la tête du contactor (courant_18).

III.3.2.4. Constituants :

Les constituants pris en compte dans la simulation ainsi que leurs formules chimiques présentés ci-après.

Constituant	Formule Chimique
Méthane	CH ₄
Ethane	C ₂ H ₆
Propane	C ₃ H ₈
n-butane	C ₄ H ₁₀
Isobutane	C ₄ H ₁₀
n-pentane	C ₅ H ₁₂
Nitrogène	N ₂
Carbone dioxyde	CO ₂
Water	H ₂ O
Tri éthylène glycol	C ₆ H ₁₄ O ₄

III.3.2.5. Conditions opératoires :**Alimentation du procédé :****Gas:**

- Flow: 498.6 kg mol /h
- Temperature: 29.44 °C
- Pressure: 62.05 bar

• Molar composition:

Methane: 0.8980

Ethane: 0.0309

Propane: 0.0147

i-Butane: 0.00688

n-Butane: 0.0029

i-Pentane: 0.0009

n-Pentane: 0.0004

Water: 0.0010

TEG glycol: 0.0000

Nitrogen: 0.00237

Carbon dioxide 0.00166

Hydrogen sulphide 0.00000

Contractor:

- Pressure: 62.05 bar
- Gas temperature: 31.14 °C
- Glycol Temperature: 30.17 °C

Absorbeur - Contactor:

Paramètres de fonctionnement	Valeur
Type de colonne	Absorbeur
Nombre d'étages théoriques	4
Plateau d'alimentation	1
Pression de sortie (bar)	62.05

Cooler_2

Paramètres de fonctionnement	Valeur
Type d'échangeur	Consignateur de température
Température de sortie (°C)	28.7

Heater_1

Paramètres de fonctionnement	Valeur
Type d'échangeur	Echangeur Simple
Spécification par courant d'information	-

Régénérateur /C201

Paramètres de fonctionnement	Valeur
Type de colonne	Stripper
Nombre d'étages théoriques	7
Plateau d'alimentation	2
Quantité de chaleur à soutirer au condenseur (kw)	3
Pression de sortie (bar)	1,05

III.3.3. Résultats de simulation:

III.3.3.1. Bilans de matière et énergie:

Tableau III.14. Bilans de matière et énergie.

Courants	2	3	6	7	17	18
De	Cooler_1	Inlet scrubber	Contacteur	Flash valve	TEG_pump	Cooler_3
Vers	Inlet scrubber	Contacteur	Flash valve	Heater_1	Cooler_3	Contacteur
Débit molaire	Kgmole/h	Kgmole/h	Kgmole/h	Kgmole/h	Kgmole/h	Kgmole/h
METHANE	447.72	447.72	$7.8341 \cdot 10^{-2}$	$7.8341 \cdot 10^{-2}$	$2.0378 \cdot 10^{-6}$	$2.0359 \cdot 10^{-6}$
ETHANE	15.440	15.440	$7.557 \cdot 10^{-3}$	$7.557 \cdot 10^{-3}$	$8.6225 \cdot 10^{-7}$	$8.6174 \cdot 10^{-7}$
Propane	7.3714	7.3714	$6.1253 \cdot 10^{-3}$	$6.1253 \cdot 10^{-3}$	$1.5856 \cdot 10^{-6}$	$1.5848 \cdot 10^{-6}$
i-Butane	2.93860	2.9386	$1.0741 \cdot 10^{-3}$	$1.0741 \cdot 10^{-3}$	$1.5958 \cdot 10^{-7}$	$1.5941 \cdot 10^{-7}$
n-Butane	1.4942	1.4942	$6.1466 \cdot 10^{-4}$	$6.1466 \cdot 10^{-4}$	$1.0799 \cdot 10^{-7}$	$1.0788 \cdot 10^{-8}$
i-pentane	0.49807	0.49807	$8.6391 \cdot 10^{-5}$	$8.6391 \cdot 10^{-5}$	$2.9476 \cdot 10^{-8}$	$1.7534 \cdot 10^{-8}$
Nitrogène	0.49807	0.49807	$5.177 \cdot 10^{-4}$	$5.177 \cdot 10^{-4}$	$5.7740 \cdot 10^{-8}$	$5.7748 \cdot 10^{-8}$
CO2	14.145	14.145	$3.5754 \cdot 10^{-2}$	$3.5754 \cdot 10^{-2}$	$1.3761 \cdot 10^{-5}$	$1.3767 \cdot 10^{-5}$
H2S	7.7201	7.7200	$8.4678 \cdot 10^{-2}$	$8.4678 \cdot 10^{-2}$	$2.0998 \cdot 10^{-6}$	$2.1018 \cdot 10^{-4}$
H2O	0.49896	0.43254	0.67835	0.67835	027198	0.27200
TEGLYCOL	0	0	3.3764	3.3764	3.3765	3.3765
Total Débit	498.56978	498.50326	4.26985	4.26985	3.3765	3.64874
Fractions massiques						
METHANE	0.781395	0.781497	0.002391	0.002391	0.000000	0.000000
ETHANE	0.050509	0.050516	0.000444	0.000444	0.000000	0.000000
Propane	0.035363	0.035367	0.000514	0.000514	0.000000	0.000000
i-Butane	0.018582	0.018584	0.000119	0.000119	0.000000	0.000000
n-Butane	0.009448	0.009450	0.000068	0.000068	0.000000	0.000000
i-pentane	0.003909	0.003910	0.000022	0.000022	0.000000	0.000000
Nitrogène	0.001518	0.001518	0.000028	0.000028	0.000000	0.000000
CO2	0.067724	0.067724	0.002994	0.002994	0.000001	0.000001
H2S	0.028619	0.028623	0.005490	0.005490	0.000014	0.000014
H2O	0.000978	0.000848	0.023251	0.023251	0.009571	0.00657
TEGLYCOL	0	0	0.964669	0.964669	0.990414	0.990413
Etat physique	Liq/Vap	Vap	Liq	Liq	Liq	Liq
Température °C	29.44	29.44	30.17	35.51	144.0	48.89
Presssure kPa	6205	6205	6205	179.3	6274	6205
Enthalpy kj/kgmole.C	$-8.571 \cdot 10^{-4}$	$-8.568 \cdot 10^{-4}$	$-6.809 \cdot 10^{-5}$	$-6.809 \cdot 10^{-5}$	$-7.194 \cdot 10^{-5}$	$-7.524 \cdot 10^{-5}$
Vapor fraction	0.9999	1.000	0.0000	0.0362	0	0

III.4. Analyse et optimisation du procédé:

Pour optimiser le fonctionnement de l'unité, l'impact des paramètres suivants peut être facilement étudié avec le modèle de simulation présenté:

- Le nombre d'étages théoriques du contactor
- Le débit de circulation de glycol
- La température du rebouilleur du TEG
- La pression du inlet separator

Il est à noter que la température du rebouilleur de TEG est limitée par la température de dégradation thermique du glycol.

La pression du inlet separator fait varier la quantité de gaz de stripping et donc les performances du regenerator.

Ces deux paramètres font varier la teneur en eau dans le TEG sec.

D'autres paramètres peuvent également avoir une influence, plus limitée. Le nombre d'étages théoriques du regenerator de TEG a un impact faible sur la pureté du TEG recyclé.

De même la température de sortie de l'échangeur de chaleur Heater_2 influe sur la puissance du rebouilleur.

La température du TEG à l'entrée du contactor affecte la tension de vapeur de l'eau sur l'étage de tête.

En conséquence, une température du TEG plus faible diminuera la teneur en eau dans le gaz sec.

En pratique, la diminution de cette température augmente aussi la quantité de gaz absorbée avec le TEG et donc les pertes de gaz. Cette température est contrôlée par la régulation de température en sortie de l'échangeur de chaleur Heater_2.

.III.5. Conclusion :

Six cas différents pour étudier le mélange Eau/Glycol ont été créés dans logiciel MATLAB. Ces six différents cas ont simulé le mélange eau/glycol de façon pas totalement satisfaisante. Ils ont toutefois tous illustré certains des problèmes associés à la simulation du mélange eau/glycol. Cela montre que l'eau et glycol forment un mélange liquide fortement non -idéal.

La façon la plus simple pour simuler l'usine de déshydratation est d'insérer un séparateur de constituants.

Quand une usine de déshydratation est simulée, il est important de connaître les paramètres de fonctionnement et les unités requises dans l'usine de déshydratation. D'après notre étude nous pouvons conclure que les résultats obtenus avec HYSYS sont meilleurs et facile à simuler.

CONCLUSION GENERALE

Il existe plusieurs processus impliqués dans le traitement du fluide du réservoir du pétrole du gaz et de l'eau.

Un du plus important processus est la déshydratation du gaz, parce que le gaz humide augmente la corrosion.

L'absorption avec le TEG offre d'avantage le meilleur choix de coût dans le processus de déshydratation.

Le processus de déshydratation est divisé en deux parties, la déshydratation et la régénération.

Pour le processus de déshydratation, le gaz est séché par le glycol. Pour le processus de la régénération, l'eau est enlevé du glycol donc il peut être utilisé pour la déshydratation une fois de plus.

Le principal problème dans la simulation du processus de déshydratation est que l'eau et glycol forment un mélange liquide fortement non-idéal

Il n'était pas possible de simuler le mélange Eau/Glycol adéquatement dans logiciel MATLAB.

Les simulations avec PR-WS ont également échouées parce que le programme MATLAB ne pourrait pas calculer le problème de déshydratation.

Tant que logiciel MATLAB ne peut pas simuler le mélange Eau/Glycol, il est impossible de simuler une usine de déshydratation avec MATLAB.

Toutefois, il est possible de simuler l'unité de déshydratation dans le simulateur HYSYS.

REFERENCES :

- [1] : Site d'internet : www.futura-science.com
- [2] : Revue Sonatrach : Rapport annuel 2004
- [3] Natural Gas – Production, Processing, Transport; A. Rojey et.al; Editions Technip; 1997.
- [4] Fundamentals of Natural Gas Processing; Arthur J. Kidnay and William R. Parrish; Taylor & Francis Group 2006.
- [5] KHAIRUL RAFIK B ABDULLAH, GAS DEHYDRATION PROCESS BY USING TRIETHYLENE GLYCOL AND SILICA GEL, Bachelor of Chemical Engineering (Gas Technology), Faculty of Chemical & Natural Resources Engineering University Malaysia Pahang, APRIL 2009,
- [6] A.ROJEY, B.DURAND, et al. Le gaz naturel production traitement transport. Ed Technip Paris 1994.
- [7] M.MEYER, G.RENESME, Les procédés de séparation par perméation gazeuse à travers des membranes polymères organiques, Recueil des communications du 18^{ème} congrès du gaz .pp :3-54, Montpellier, 1991.
- [8] Dan Laudal Christensen, thermodynamic simulation of the water/ glycol mixture, Master thesis, Aalborg University Esbjerg, February 2009
- [9] Perry's Chemical Engineers' Handbook; Robert H. Perry and Don W. Green; 8th ed; McGraw-Hill 2007.
- [10] Oilfield Processing of Petroleum - Vol. 1 Natural Gas; F. S. Manning and R. E. Thompson; 1st ed.; Pennwell Publishing Company 1991.
- [11] Specification for Glycol-Type Gas Dehydration units – API Specification 12GDU; American Petroleum Institute; 1990.
- [12] MOHD HANAFI B SULAIMAN, GAS DEHYDRATION USING GLYCOL SOLUTION IN ABSORPTION AND ADSORPTION UNIT, Bachelor of Chemical Engineering (Gas Technology), Faculty of Chemical & Natural Resources Engineering UNIVERSITI MALAYSIA PAHANG, p 11, avril 2009.

LISTE DES TABLEAUX:

Tableau II.1: propriétés de MEG, DEG, TEG, TREG et l'eau	19
Tableau II.2: α , β et γ dans l'équation d'état sélectionné	24
Tableau III.1 : Les différents cas d'étude	39
Tableau III.2 : Données du flux entrant pour la simulation	40
Tableau III.3 : Composition des phases dans le Cas 1	47
Tableau III.4 : Composition des phases dans le Cas 2	47
Tableau III.5 : valeurs de ψ et K dans le cas 3a	48
Tableau III.6 : valeurs de ψ et K dans le cas 3b	48
Tableau III.7 : valeurs de ψ et K dans le cas 3c	48
Tableau III.8 : Valeurs de ψ et K dans le cas 3d	49
Tableau III.9 : Données de l'équation d'état dans le cas 3e	49
Tableau III.10 : valeurs de ψ et K dans le cas 3f	49
Tableau III.11 : Composition des phases dans le cas 4	50
Tableau III.12 : Composition des phases dans le cas 5	50
Tableau III.13 : Constants d'équilibre dans le cas 6	50
Tableau III.14: Bilans de matière et énergie	58

LISTE DES FIGURES:

Figure I.1 : La composition chimique du gaz naturel	3
Figure I.2: L'hydrate de gaz	11
Figure II.1: Procédé de déshydratation par adsorption	16
Figure II.2 : Schéma de principe de perméation gazeuse	17
Figure II.3 : Déshydratation par abaissement de la température	18
Figure III.1: Élément de maillage	30
Figure III.2: Algorithme de Rachford-Rice	36
Figure III.3: Le code MATLAB pour les variables globales et les données critiques	41
Figure III.4: Données d'entrée pour le MATLAB	41
Figure III.5: Calcul de fractions des phases	42
Figure III.6: Calcul de la composition de la phase	42
Figure III.7: Calcul de a et b pour PR	43
Figure III.9: Calcul de Z avec PR	43
Figure III.10: Calcul du coefficient de fugacité	44
Figure III.11: Calcul de a et b avec PRSV	44
Figure III.12: Calcul de a, b et le terme de Wong-Sandler	45
Figure III.13: Calcul de Q, D, am et bm avec Wong-Sandler	45
Figure III.14: Calcul du coefficient de fugacité pour Wong-Sandler	45
Figure III.15: Calcul des fractions pour trois phases	46
Figure III.16 : Schéma du procédé	53
Figure III.17 : Modèle de simulation de déshydratation par HYSYS	54