



Mémoire présentée en vue de l'obtention
du diplôme de Master en : Génie des Procédés

Option : Génie Chimique

THÈME

Etude d'une unité de fabrication de produits fluorés

Présenté par :
LAMARA Hamza

Devant le jury composé de :

Président : Dr. LAIADI Djemoui
Encadreur : Pr. HASSEINE Abdelmalek
Examineur : Dr. MERZOUGUI Abdelkarim

Promotion Juin 2015

Remerciement

*Louange à Dieu qui ma donné la force, le courage et l'espoir
nécessaire pour accomplir ce travail et surmonter l'ensemble des difficultés*

*J'exprime ma gratitude, mes remerciements à **mes parents***

qui ont fait de leur mieux pour m'aider.

Je tiens remercier vivement:

- *Mon encadreur professeur ***Mr. HASSEINE Abdelmalek ****

Pour ces conseils et son suivi durant la réalisation de mon projet.

- *A ***Mr. LAIADI Djemoui*** et *** Mr. MERZOUGUI Abdelkrim ****

qui ont bien faire partie du jury.

*Je remercie aussi les personnes (**mes enseignants et mes collègues**)*

qui m'ont aidé et encouragé le long de ce travail.

Résumé :

La conception des procédés assistée par ordinateur (CAO) est un outil utilisé dans différents domaines de l'ingénierie et la recherche en générale, permettant d'analyser le comportement d'un système avant de l'implémenter et d'optimiser son fonctionnement en testant différentes solutions et différents conditions opératoires. Dans ce travail, la simulation et l'optimisation d'un procédé de fabrication des produits fluorés sont effectuées en utilisant le logiciel " ASPEN HYSYS ". C'est un simulateur modulaire séquentiel qui contient des modèles de procédé unitaires ainsi qu'une base de données très étendue incluant les propriétés physique et chimique des matières. Il permet en outre d'accéder aux variables d'écoulement et thermodynamique avec lesquelles on détermine l'énergie des courants de matière ainsi que la consommation d'énergie et les rendements des différents procédés.

Mots clés : CAO, produits fluorés, procédé, ASPEN HYSYS.

Abstract:

Computer-aided design process (CADP) is a tool used in various of engineering and research in general, to analyze the behavior of system before implementing it and optimize its operation testing different operating condition. In this work, the simulation and optimization of a process of fluorinated products manufacturing are performed using " ASPEN HYSYS " software. It is a sequential modular simulator that contains process models and base unit of extensive data, including physical and chemical properties of materials. It also allows access to the flow and thermodynamic variables with which one determines the energy flows of material and energy consumption and yields of different methods.

Keywords: CADP, fluorinated products, process, ASPEN HYSYS.

ملخص:

عملية التصميم المدعوم بالحاسوب (CAO) هو أداة تستخدم في مختلف المجالات الهندسية و البحوث في الغالب , لتحليل سلوك النظام قبل تنفيذه و تحسين عمله و اختبار الحلول و ظروف التشغيل المختلفة . في هذا العمل يتم تنفيذ المحاكاة و الاستفادة المثلى من طريقة تصنيع المنتجات الفلورية باستخدام برنامج " ASPEN HYSYS " و هو محاكاة وحدات متتابعة يحتوي على نماذج عملية تمثل قاعدة بيانات واسعة النطاق , بما في ذلك الخصائص الفيزيائية و الكيميائية للمادة . كما يسمح بالوصول الى المتغيرات الحرارية و التدفق . كما يحدد تدفقات الطاقة من المواد و استهلاك الطاقة و مردودية مختلف الاساليب .

كلمات مفتاحية: CAO, المنتجات الفلورية, طريقة, " ASPEN HYSYS "

SOMMAIRE

Remerciement

Résumé

Nomenclatures

Listes des figures

Liste des tableaux

INTRODUCTION GENERALE 1

Chapitre. I : Généralité sur les opérations unitaires

I-1: Historique 2

I.2.Opérations de génie chimique 2

I.3.Les opérations unitaires 3

I.4.Classification des opérations unitaires 4

I.4.1.Classification selon les phénomènes physiques mis en œuvre 4

I.4.1.1 .Opérations unitaires avec ou sans transfert de matière 4

I.4.1.2.Opérations unitaires avec ou sans transfert de chaleur 4

I.4.2.Classification selon les fonctions des opérations unitaires..... 5

I.4.3.Classification selon les modes de réalisation 7

I.4.3.1.Processus continus et discontinus 7

I.4.3.2.Processus séquentiels et semi-continus 8

I.5.Modes de mise en contact 8

I.6.La distillation 9

I.6.1.Définition de la distillation 9

I.6.2.Principe de la distillation 10

I.6.2.1.Distillation continue 10

I.6.2.2.Distillation discontinue 10

I.6.2.3.. Distillation sous vide 11

I.7. L'absorption..... 11

I.8 Le Compresseur..... 12

Chapitre. II : Généralité sur les produits fluores

II.1 Historique	13
II.2 Propriétés physiques	13
II.3 L'importance des produits fluorés dans notre vie quotidienne	14
II.3.1. En chimie	14
II.3.2. En biologie et médecine	15
II.3.3. En agrochimie	15
II.3.4. En microélectronique	15
II.3.5. Dans le stockage et la conversion de l'énergie	15
II.4 Trifluorométhane :	15
II.5 Dichlorofluorométhane :	16
II.6 Difluorochlorométhane :	17

Chapitre. III : III. La simulation et le simulateur HYSYS

III.1 introduction.....	18
III.2. Principes de fonctionnement et rôle des simulateurs	18
III.3 Modes de fonctionnement des simulateurs:	19
III.4 utilisation de la simulation	20
III.5 Concepts et caractéristiques du simulateur HYSYS	20
III.5.1 Concepts de base du simulateur HYSYS :	20
III.5.1.a Environnement de simulation	20
• Environnement « Basis Manager »	20
• Environnement « Oil Characterization »:	21
• Environnement « Main Flowsheet »:	21
• Environnement « Sub-Flowsheet »:	22
• Environnement « Column »:	22
III.5.2 Caractéristiques principales de HYSYS:	23
III .6 les modèles thermodynamique de HYSYS	25
III.6.1. Les équations d'état	25
III.6.2. Equation de PENG-ROBINSON	25

Chapitre. IV : Résultats et discussions

IV.1. introduction	26
IV.2.L'équipement utilisé dans la simulation	26
a) Compresseur (k-100)	26
b) Echangeur de chaleur (E-100)	26
c) Compresseur (k-101)	26
d) Condenseur (E-101)	26
e) Colonne de distillation (T-100)	26
f) Colonne de distillation (T-101)	26
IV.3. Description du procédé	26
III.4. Simulation avec le modèle thermodynamique ' Peng-Robinson '	28
• Etape 6	28
• Etape 7	30
• Etape 8	31
IV.5. Résultat et discussion	33
IV.5.1. Au niveau de la première colonne de distillation	33
IV.5.2. Au niveau de la deuxième colonne de distillation	36
IV.6. Simulation avec le modèle thermodynamique ' NRTL '	38
IV.6.1. Au niveau de la première colonne de distillation	38
IV.6.2. Au niveau de la deuxième colonne de distillation	40
IV.7. Optimisation du procédé	42
IV.7.1. Influence de la pression	42
IV.7.2. Influence de la température d'alimentation	43
IV.7.3. Influence du nombre de plateaux	43
IV.7.4. Influence de la position d'alimentation	44

IV.7.5. Influence du taux de reflux	45
<i>Conclusion générale</i>	46

NOMENCLATEURS

Symbole	définition
n	Nombre du plateau
T	Température
T _{IN}	Température d'entrée
T _{OUT}	Température de sortie
T _{bouilleur}	Température de bouilleur
P	Pression
P _{IN}	Pression d'entrée
P _{OUT}	Pression de sortie
P _{bouilleur}	Pression de bouilleur
q	Débit molaire
D	Débit de distillat
W	Débit de résidu
CHF ₃	Trifluorométhane
CHF ₂ Cl	Difluorochlorométhane
CHCl ₂ F	Dichlorofluorométhane
PR	Modèle thermodynamique ' Peng-Robinson '
NRTL	Modèle thermodynamique

Liste des figures

Chapitre	La liste des figures	Page
Chapitre II	Figure II.1 : Structure de CHF3	16
	Figure II. 2: Structure de CHCl2F	16
	Figure II. 3: Structure de CHClF2	17
Chapitre III	Figure. III.1 : Interface HYSYS m'entrant quelques vocabulaires qui sont utilisés pendant les étapes de construction d'un modèle	22
	Figure. III.2 : Environnements de développement dans HYSYS	23
	Figure. III.3 : Organigramme des environnements dans la hiérarchie	24
Chapitre IV	Figure IV. 1:Schéma opérationnelle de l'unité de fabrication des produits fluorés	27
	Figure IV.2: Schéma de la production des produits fluorés par logiciel HYSYS	28
	Figure IV.3 : Fenêtre des compositions des produits fluorés	28
	Figure IV.4: Fenêtre des conditions de 1 ^{er} étage de compresseur	29
	Figure IV. 5 : Fenêtre des conditions d'échangeur	29
	Figure IV.6 : Fenêtre des conditions de 2 ^{ème} étage de compresseur	30
	Figure IV.7 : Fenêtre des conditions de condenseur	30
	Figure IV.8 : Page de connexion de la première colonne de distillation	31
	Figure IV.9 : Fenêtre des compositions des composants de distillat	31
	Figure IV.10: Page de connexion de la deuxième colonne de distillation	32
	Figure IV.11 : Fenêtre des compositions dans la deuxième colonne de distillation	32

Figure IV.12 : Fenêtre des conditions de la deuxième colonne de distillation	33
Figure IV.13 : Variation de la température dans la première colonne de distillation	34
Figure IV.14 : Variation des débits molaires dans la première colonne de distillation	34
Figure IV.15 : Variation des compositions de la phase liquide dans la première colonne de distillation	35
Figure IV.16: Variation des compositions de la phase vapeur dans la première colonne de distillation	35
Figure IV.17 : Variation de température dans la deuxième colonne de distillation	36
Figure IV.18 : Variation des débits molaires dans la deuxième colonne de distillation	36
Figure IV.19 : Variation de la composition de la phase liquide dans la deuxième colonne de distillation	37
Figure IV.20 : Variation des compositions de la phase vapeur dans la deuxième colonne de distillation	37
Figure IV.21 : Variation de température en fonction de numéro du plateau avec modèle NRTL dans la première colonne de distillation	38
Figure IV.22: Variation des débits molaires dans la première colonne de distillation avec modèle NRTL	38
Figure IV.23 : Variation des compositions de la phase liquide dans la première colonne de distillation avec modèle NRTL	39
Figure IV.24 : Variation des compositions de la phase vapeur dans la première colonne de distillation avec modèle NRTL	39
Figure IV.25 : Variation de température en fonction de numéro du plateau avec modèle NRTL dans la deuxième colonne	40
Figure IV.26 : Variation des débits molaires dans la deuxième colonne de distillation avec modèle NRTL	41

Figure IV.27 : Variation des compositions de la phase liquide dan la deuxième colonne de distillation avec modèle NRTL	41
--	----

Figure IV.28 : Variation des compositions de la phase vapeur dan la deuxième colonne de distillation avec modèle NRTL	42
---	----

Liste des tableaux

Chapitre	La liste des tableaux	Page
Chapitre I	Tableau I.1 : Classification des opérations unitaires selon leur fonction	5 ,6 ,7
	Tableau I.2 : Divers types de compresseur avec leurs caractéristiques essentielles	13
Chapitre III	Tableau III.1 : Domaines d'application de l'équation PR	25
Chapitre IV	Tableau III 1 : les fractions molaires avec les modèles thermodynamiques PR et NRTL au niveau de la 1 ^{ère} colonne	40
	Tableau IV 2 : Fractions molaires avec les modèles thermodynamiques PR et NRTL au niveau de la 2 ^{ème} colonne	42
	Tableau IV.3 : Influence de la pression sur le fonctionnement de la deuxième colonne de distillation	43
	Tableau IV.5 : Influence de la position d'alimentation sur le fonctionnement de la deuxième colonne de distillation	43
	Tableau IV.6 : Influence du nombre de plateau sur le fonctionnement de la deuxième colonne de distillation	44
	Tableau IV.7 : Influence de la position d'alimentation sur le fonctionnement de deuxième colonne de distillation	44
	Tableau IV.8 : Influence du taux de reflux sur le fonctionnement de la deuxième colonne de distillation	45

INTRODUCTION GÉNÉRALE

Le fluor est un élément chimique de symbole F et de numéro atomique 9. Il s'agit du premier élément de la famille des halogènes, de masse atomique 19.

C'est un gaz jaune verdâtre d'une odeur piquante et irritante, toxique, non combustible mais capable d'oxyder dangereusement vite tout ce qui peut brûler dans l'air et même l'eau, le verre ou le sable ordinaires réagissent dans une atmosphère de fluor. C'est un élément très actif chimiquement, rarement monoatomique.

C'est l'élément chimique le plus réactif, d'ailleurs il a toujours été trouvé lié à d'autres éléments. Il possède la plus forte électronégativité, d'une valeur de 3,98. Il est le 13^e élément le plus abondant dans la croûte terrestre. Le seul isotope stable est ¹⁹F. [1]

Les gaz fluorés sont utilisés dans des produits tels que les réfrigérateurs, les climatisations, Les gaz fluorés sont également utilisés dans la production de métaux et de semi-conducteurs.

L'objectif principal de cette étude est la simulation et l'optimisation d'une unité de fabrication des produits fluorés à l'aide de logiciel de simulation (**Aspen HYSYS**).

Le travail présenté dans ce mémoire de Master sera organisé de la manière suivante :

- Dans le premier chapitre, nous présentons d'abord des rappelles théoriques sur les opérations unitaires.
- Le deuxième chapitre, présentera les différentes informations sur le fluor et les produits fluorés
- Le chapitre trois sera consacré à la présentation de logiciel Aspen HYSYS et la simulation en général.
- Dans le dernier chapitre les résultats de simulation obtenus à l'aide HYSYS sont présentés. Les résultats obtenus avec chaque modèle thermodynamique PR et NRTL sont comparés en termes de l'efficacité.

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

I.1.Historique :

La date de naissance du génie chimique moderne peut être située entre 1915 [2], et 1923, où ce concept est repris dans un ouvrage [3], pour la première fois, des opérations concernant le transport des fluides, les échanges de chaleur, les changements de phase, les techniques de séparation, font l'objet d'études en soi et de théories quantitatives. La seconde révolution a lieu en 1960 avec la publication du livre [4], où sont analysés en profondeur les processus élémentaires de transport de matière, d'énergie et de quantité de mouvement qui sont à la base des opérations unitaires. Vers la même époque, le couplage de ces processus avec la réaction chimique est pris en compte, dans une théorie générale des réacteurs chimiques. C'est une étape décisive vers une compréhension fondamentale et unitaire du fonctionnement des procédés. Simultanément, le développement des moyens de traitement de l'information ouvre la voie aux modèles mathématiques et aux représentations conceptuelles abstraites qui caractérisent le génie chimique moderne. Les années 1970-1980 voient un retour à une meilleure prise en compte des contraintes socio-économiques, en particulier la protection de l'environnement. Aujourd'hui, la crise de l'énergie (recherche de substituts au pétrole, utilisation rationnelle de l'énergie), la nécessité de développer une chimie fine à haute valeur ajoutée et l'avènement prévisible des biotechnologies offrent de nombreuses perspectives au développement du génie chimique [5].

I.2.Opérations de génie chimique :

La traduction en termes industriels d'un mode opératoire par une structure constituée du réacteur chimique et de l'ensemble des opérations unitaires définit le procédé.

Cet enchaînement d'opérations types, dont le principe se retrouve d'un procédé à l'autre, quelle que soit la nature du produit fabriqué, a conduit à l'idée de diviser le génie chimique en deux parties principales

- les réacteurs chimiques, qui permettent à une réaction chimique de s'accomplir;
- les opérations unitaires, grâce auxquelles on prépare les réactifs et on effectue les séparations des constituants d'un mélange qui permettent ainsi le bon fonctionnement du réacteur chimique.

I.3. Les opérations unitaires :

Les opérations sont dites unitaires car elles sont fondées sur des règles de nature physique à caractère général et traduisent des transformations simples.

Le principe fondamental de toute opération unitaire est toujours le même, à savoir la préparation et la mise en contact intime des phases en présence pour assurer le développement des réactions, les mécanismes de transport et de transfert de masse (ou matière), de chaleur et de quantité de mouvement qui ont lieu durant la chaîne de transformation, ainsi que la séparation des constituants du mélange résultant.

Les opérations unitaires représentent donc un concept utilisé par les ingénieurs chimistes afin de permettre de façon optimale la transformation des substances brutes déterminées en un ou plusieurs produits (naturels ou artificiels) commercialisables ou en produits de base destinés à une autre usine chimique

Le choix d'une opération unitaire dépend de différentes considérations :

- la possibilité effective de séparation sur des bases thermodynamiques;
- la possibilité offerte par la cinétique physique d'avoir un transfert plus ou moins rapide selon la nature des phases en présence;
- la volonté d'utiliser préférentiellement certaines sources d'énergie (par exemple l'énergie électrique);
- le souhait d'économiser de l'énergie ou de diminuer les frais de fonctionnement ainsi que celui d'abaisser les coûts d'investissement [5].

I.4. Classification des opérations unitaires :

Une classification universelle et exhaustive satisfaisante est difficile. Cependant, malgré l'appareillage très varié nécessaire pour la production industrielle, il est possible de classer les opérations unitaires de plusieurs manières.

I.4.1. Classification selon les phénomènes physiques mis en œuvre :

Les principales opérations mettant essentiellement en jeu des processus physiques, on peut ainsi les rattacher aux deux grandes familles suivantes

I.4.1.1. Opérations unitaires avec ou sans transfert de matière :

À leur tour les opérations unitaires peuvent se diviser en deux grandes classes :

- ✚ les processus de séparation par diffusion (évaporation, distillation, absorption, sublimation, adsorption, etc.) qui conviennent aux alimentations formées par mélanges homogènes;

- ✚ les processus sans transfert de matière qui sont d'une part les opérations de simple séparation mécanique des mélanges hétérogènes (filtration, cyclonage, centrifugation), d'autre part les opérations modifiant la granulométrie de solides (broyage, frittage).

I.4.1.2. Opérations unitaires avec ou sans transfert de chaleur :

Souvent, les opérations unitaires nécessitent un transfert de chaleur, ainsi il est possible de réaliser une classification en se rapportant aux quantités d'énergie thermique mises en jeu. On distingue :

Les opérations se déroulant sans (ou pratiquement sans) transfert de chaleur, telles que :

- ultrafiltration, osmose inverse, extraction par liquide (pour un transfert de masse entre phases fluides);
- adsorption, échange d'ions, chromatographie en phase liquide, lixiviation (pour un transfert de masse entre phases fluides et solides);

Les opérations nécessitant d'importants échanges de chaleur :

- distillation, évaporation, séchage des liquides (pour un transfert de masse entre phases fluides);
- cristallisation, lyophilisation, cryoconcentration (pour phases fluides solides);

Les opérations mixtes qui ont lieu de manière isotherme ou non, selon les concentrations considérées et qui intéressent surtout les épurations en présence d'une phase gazeuse inerte en excès :

- absorption, désorption (phases fluides);
- adsorption en phase vapeur, chromatographie en phase gazeuse, séchage des solides.

I.4.2. Classification selon les fonctions des opérations unitaires :

Pour plus de clarté, on envisage, dans la suite, les opérations unitaires sous l'angle d'une classification à partir de leur fonction telle qu'elle est résumée dans le tableau I.1.

Tableau I.1 : Classification des opérations unitaires selon leur fonction.

Opérations unitaires	Fonctions
Opérations fondées sur la mécanique des fluides	
Manipulation et transport des fluides	Stockage et transport des fluides. Contrôle et mesure du débit de gaz, liquide et vapeur.

Homogénéisation et agitation	Mise en contact des liquides, solides et gaz afin d'obtenir un mélange homogène des fluides ou un contact intime des phases.
Filtration et clarification	Séparation des particules solides à partir d'un liquide ou gaz.
Épaississement et sédimentation	Concentration des solides à partir de leur mélange avec des liquides.
Classification	Séparation des particules solides en groupes présentant de propriétés différentes (dimension, masse volumique, composition chimique, etc.).
Centrifugation	Séparation d'un mélange de deux phases liquides ou d'une phase solide en suspension dans une phase liquide, par l'action de la force centrifuge.
Opérations fondées sur le transfert thermique	
Échange de chaleur et condensation	échauffement, refroidissement et condensation des fluides avec ou sans changement d'état.
Fours industriels Évaporation et ébullition	Chauffage à haute température des matériaux. Évaporation des liquides, concentration des solutions de solides non volatiles, récupération de l'eau distillée.
Séchage	Récupération de l'humidité ou d'autres liquides d'un solide par évaporation ou autres moyens.
Tours de refroidissement et réfrigération	Refroidissement de l'eau afin de la réutiliser dans les condenseurs ou installations de conditionnement d'air.
Opérations fondées sur le transfert de matière	

Distillation	Séparation des liquides miscibles par évaporation
Extraction liquide-liquide	Séparation des liquides miscibles par différence de solubilité.
Lixiviation	Extraction des substances solides dissoutes dans un liquide par un solvant.
Absorption et désorption	Lavage des gaz solubles d'un mélange ayant un constituant inerte par un liquide. Récupération des gaz dissous dans un liquide
Adsorption	Récupération sélective des substances à partir de liquides ou gaz par réaction chimique avec des solides.
Échange d'ions	Échange réversible avec les ions de même signe des différentes solutions. Adoucissement de l'eau.
Diffusion des gaz, humidification et déshumidification	Séparation des mélanges gazeux par différence de température ou par d'autres méthodes spécifiques. Contrôle de l'humidité ou de la vapeur contenue dans un gaz.
Opérations fondées sur des principes mécaniques	
Tamissage	Triage des particules solides selon leur dimension à l'aide d'un tamis.
Stockage et déplacement des solides	Transport des solides. Stockage et chargement en quantité contrôlée dans un appareil de fabrication.

I.4.3. Classification selon les modes de réalisation :

Enfin, on peut également classer les opérations unitaires d'après leurs régimes de fonctionnement. Certaines opérations sont menées en discontinu (batch), par charges successives, d'autres sont conduites en continu.

Un système fonctionne en régime permanent si toutes ses caractéristiques (pression, concentration, température) sont constantes dans le temps. Dans le cas contraire, par exemple lors des démarrages ou des changements de marche, l'opération est dite en régime transitoire .

I.4.3.1.Processus continus et discontinus :

Dans un processus continu, dans la mesure où le fonctionnement est parfait, les différents paramètres, notamment les débits, sont constants dans le temps en chaque point de l'installation. Les réactifs à mélanger, ou le mélange à séparer, arrivent en un point de l'appareillage, tandis que la masse après réaction ou les produits séparés sortent en d'autres points. Il faut noter que le fonctionnement en continu permet généralement une régulation automatique très poussée qui conduit à une qualité absolument constante du produit. Dès lors le travail en continu convient pour une fabrication déterminée et, étant donné la haute technologie et la fiabilité du matériel, implique une longévité commerciale du produit à fabriquer ainsi que des productions journalières très élevées, afin de rentabiliser l'investissement très important.

Avantage :

- qualité de production constante ;
- coût de production inférieur à celui d'une opération discontinue ;
- besoins réduits en personnel ;
- plus grande sécurité et meilleures conditions sanitaires (automatisation et pilotage déporté de l'installation).

Inconvénients :

- investissements élevés (notamment pour contrôles et régulations) ;
- nécessité d'une régularité dans la qualité des matières premières ;
- spécificité de l'appareillage.

Dans un processus discontinu, la situation du système change constamment dans le temps et plusieurs phases de l'opération peuvent être exécutées successivement dans le même appareil; en continu, ces diverses phases ont lieu simultanément, chacune d'entre elles dans un appareil spécialisé.

Avantage :

- appareillage polyvalent, charges faibles ;
- pas de problème de circulation de certaines matières (pâtes) ;
- parfois rendements plus élevés.

Inconvénients :

- coût énergétique élevé (chauffage et refroidissement pour chaque charge) ;

- temps morts (remplissage, soutirage, refroidissement...) ;
- besoin élevé en personnel (manutention, surveillance...) ;
- qualité de production pouvant évoluer dans le temps ;
- coût de production élevé.

I.4.3.2.Processus séquentiels et semi-continus

Entre ces deux catégories principales, on trouve les régimes de marche séquentielle et les régimes semi-continus.

La marche séquentielle est un fonctionnement en continu qui n'est perturbé que de temps en temps par une séquence en discontinu qui n'interrompt ni l'entrée ni la sortie des réactifs principaux (par exemple l'évacuation du solide hors de l'appareil dans la filtration de poussières contenues dans un gaz).

Une opération est dite en semi-continu lorsqu'il y a alimentation et/ou sortie d'au moins un réactif pendant un temps important, mais qu'il doit y avoir interruption à intervalles réguliers (par exemple l'envoi en continu d'un mélange de gaz dans une masse déterminée d'un liquide capable de retenir sélectivement l'un des gaz) [5].

I.5.Modes de mise en contact :

Il existe diverses procédures de mise en contact entre phases dans une unité d'opération : les principales sont le courant, le contre-courant, les courants croisés et l'alimentation distribuée. Le contre-courant permet en principe un échange plus poussé parce qu'il met en contact les fractions s'appauvrissant avec des fractions de pouvoir d'échange croissant.

Dans certains appareils (échangeurs de chaleur, colonnes à pulvérisation), il y a une variation continue de la température ou de la composition dans chaque phase le long de l'axe de l'appareil. Il importe alors d'éviter que le mélange en retour et la dispersion axiale ne viennent mélanger à nouveau des fractions ayant subi une évolution progressive entre l'entrée et la sortie et fassent ainsi chuter l'efficacité. Dans d'autres dispositifs, au contraire, on réalise un étagement géométrique de zones bien mélangées au moyen de cuves en série ou d'écrans évitant le mélange axial.

La plupart des schémas de procédé associent plusieurs unités d'opération comportant de nombreux recyclages où des courants de matière à différents stades de leur évolution sont renvoyés en amont de manière à réaliser plusieurs passes à travers les unités.

La cascade à contre-courant, qui réalise répétition et recyclage à la fois sur les produits et les résidus, est la plus utilisée, car c'est celle qui réalise le meilleur compromis entre qualité et quantité [5].

I.6. La distillation :

I.6.1. Définition de la distillation :

La distillation est une opération (physique) unitaire de séparation de mélange de substances liquides dont les températures d'ébullition ou les volatilités sont. Cette technique repose sur la vaporisation partielle du liquide suivie de la condensation de la vapeur ainsi formée. On obtient ainsi deux phases liquides:

- Le distillat (vapeur condensée) plus riche en composés volatils : légers
- Le résidu (fraction non vaporisée) plus riches en composés non volatils : lourds

La vaporisation d'une partie du liquide et, ensuite, la condensation de la vapeur formée nécessitent un apport et un enlèvement de calories. L'opération de distillation repose en conséquence sur des mécanismes de transfert de matière et de transfert de chaleur entre les phases liquide et vapeur.

L'opération de la distillation présente des similitudes avec les contacteurs (gaz-liquide) utilisés en absorption (gaz-liquide).

Elle présente cependant des différences avec l'absorption (gaz-liquide) à cause du rôle primordial joué par les transferts de chaleur et de leurs interactions avec les transferts de matière [6].

I.6.2. Principe de la distillation :

Le principe de la distillation, comme méthode de séparation, est basé sur la différence de volatilité des constituants du mélange à purifier. Dans un mélange binaire non azéotropique exemple ; (eau – méthanol), le constituant le plus volatil aura la température d'ébullition la plus basse (qualifié de 'léger'; méthanol, $T_{ebu} = 64,3^{\circ}\text{C}$ à 1 atm) et le constituant le moins volatil aura la température d'ébullition la plus haute (qualifié de 'lourd'; eau, $T_{ebu} = 100,0^{\circ}\text{C}$ à 1 atp). La séparation des mélanges ne cause pas de problème si la différence de volatilité des constituants ou la volatilité relative α_{ij} est assez élevée ($\alpha_{ij} > 1,2$).

La distillation peut être effectuée de plusieurs manières : continue, discontinue, sous vide [6].

I.6.2.1. Distillation continue :

Distillation continue, une forme de distillation, une séparation continue d'un mélange dans lequel est en permanence (sans interruption) alimenté dans le processus et on élimine les fractions séparées en continu sous forme de courants de sortie. Une distillation est la séparation partielle ou la séparation d'un liquide mélange d'alimentation en composants ou des fractions de sélection d'ébullition (ou évaporation) et la condensation. Un produit de distillation d'au moins deux fractions de sortie. Ces fractions comprennent au moins une volatile fraction de distillat, qui a été cuit et capturé séparément sous forme de vapeur condensée à l'état liquide, et pratiquement toujours un résidu de queue (ou) la fraction, qui est le résidu d'au moins volatil qui n'a pas été capturée séparément en tant que la vapeur condensée.

I.6.2.2. Distillation discontinue :

En distillation discontinue, le chauffage est appliqué dans un réservoir en fond de colonne (bouilleur), où le mélange est introduit. Les produits les plus légers sont recueillis en premier au condenseur qui se trouve en tête de colonne.

Lors du passage des différents composés légers, la température en tête de colonne s'accroît.

En fin d'opération, il ne reste plus que le résidu lourd en bas de colonne. Il est très difficile de donner une estimation du coût de ce procédé du fait de la variété des produits traités.

Il faut noter qu'avec cette technique il est difficile de séparer des produits dont l'écart de températures d'ébullition est inférieur à 1 degré.

En ce qui concerne les rejets générés par ce procédé, la partie non récupérable est généralement incinérée dans un centre de traitement; cependant dans le cas où elle est fortement aqueuse, elle est envoyée dans un réseau de traitement biologique des milliers d'unités utilisant ce procédé existent, elles sont aussi bien appliquées pour le traitement d'effluents, qu'en récupération de solvants (ou régénération).

I.6.2.3. Distillation sous vide:

Certains produits sont trop peu volatils à pression ambiante ou se décomposent avant de s'évaporer du fait de leur haut point d'ébullition. Dans ce cas, la pression de l'installation est réduite à l'aide d'une pompe à vide afin de réduire le point d'ébullition [6].

I.7. L'absorption :

L'absorption consiste en un transfert de matière entre une phase gazeuse et une phase liquide, cette dernière étant constituée d'un corps pur ou d'un mélange de plusieurs substances (solvant). Par ailleurs, on admet que la phase gazeuse est formée uniquement par deux composants, celui qui est en transfert, ou soluté, et le gaz porteur, inerte ou diluant.

La récupération, souvent nécessaire, de la substance qui s'est dissoute dans le liquide, est appelée désorption. L'absorption se réalise en mettant en contact le gaz contenant le soluté et le solvant pendant tout le temps nécessaire au transfert, c'est-à-dire jusqu'à ce que l'équilibre de concentration entre les deux phases soit atteint.

L'opération consiste à laver un mélange gazeux par un liquide, dans le but de dissoudre l'un des constituants gazeux dans le liquide. L'absorption est utilisée pour la purification des gaz (lavage), ou pour la séparation de mélanges gazeux. Le composé dissous peut être récupéré, par exemple, par distillation, et le solvant recyclé.

Comme la distillation, l'absorption met en jeu le contact et l'échange de matière entre une phase gazeuse et une phase liquide. L'équipement correspondant peut servir indifféremment à l'une ou l'autre des opérations. L'absorption peut être purement physique ou s'accompagner d'une réaction chimique (absorption avec réaction); le premier cas est, par exemple, celui de l'absorption des hydrocarbures légers dans un solvant constitué par des hydrocarbures moins volatils. Le phénomène ne dépend que des équilibres liquide-vapeur comme dans la distillation.

Assez courante dans l'industrie, la réaction chimique d'un ou de plusieurs constituants du mélange gazeux peut se produire avec le solvant (absorption du chlore par de l'eau) ou avec un soluté dissous dans le solvant (absorption de CO₂ et de H₂S par de l'eau).

Les absorptions avec réaction chimique nécessitent toujours une désorption par stripping à la vapeur ou par distillation, dont le coût peut devenir prohibitif dans certains cas.

Le processus d'absorption physique est préféré quand :

- ✚ le mélange de gaz d'alimentation et le constituant à absorber sont présents en grande quantité, à pression élevée;
- ✚ la fraction de gaz non absorbée doit présenter une très grande pureté;
- ✚ un ou plusieurs constituants absorbés sélectivement doivent être obtenus soit sous forme enrichie, soit sous forme pure;
- ✚ le soluté doit faire l'objet d'une opération de synthèse ultérieure.

L'absorption par réaction chimique est adoptée si :

- ✚ la récupération du solvant n'exige pas une grande quantité d'énergie;
- ✚ les constituants devant être séparés sont fortement acides et subissent une réaction thermique réversible avec le solvant;
- ✚ les constituants à séparer à partir du mélange d'alimentation sont présents en faible concentration sous une basse pression [5].

I.8 Le Compresseur :

Le compresseur sont aux gaz ce que les pompes sont aux liquide, En faisant rentre dans cette catégorie les soufflants et les ventilateurs, le terme compresseur désignera toute machine mécanique permettant la compresseur ou le transfert des gaz. Ces auxiliaires de la fabrication sont encore plus nobles que les pompes, car leur cout et en générale très élevé ; leur fonctionnement délicat et leur responsabilité énormes pour la bonne marche des unités sous pression. Un incident de compresseur toujours très grave et nécessite souvent des reflexes très rapide pour pallier cette défaillance [7].

Tableau I.2: Divers types de compresseur avec leurs caractéristiques essentielles

Types	Caractéristiques
Axial	Très rarement utilisé en raffinerie
A piston	Pour toute utilisation et tout débit, débit jusqu'à 500m ³ /h dans les conditions des l'aspiration
Centrifuge	débit jusqu'à 1500m ³ /h dans les conditions des l'aspiration taux de compression 1 à 15
Hélico	sur les fluides à température ambiante ou les problèmes d'étanchéité ne sont pas draconiens

II.1 Historique :

Le fluor (du latin fluere signifiant flux ou fondant) est d'abord mentionné au XVI^e siècle par Basile Valentin sous le nom de Flußspat puis décrit par Georgius Agricola en 1530, sous sa forme de fluorine, comme une substance utilisée pour promouvoir la fusion des métaux ou des minéraux.

Il a été dit que Heinrich Schwanhard utilisait de l'fluorhydrique pour graver le verre. Les premières explications du processus de formation de l'acide fluorhydrique furent publiées en 1725 par George Weygand, qui les tenait de Matthäus Pauli, qui lui-même les tenait d'un verrier anglais. En 1768, Andreas Marggraf décrivit la première observation de cette réaction chimique.

Inspiré par les publications d'Andreas Marggraf, Carl Scheele commença dès 1771 à chercher la nature chimique du fluor, ainsi que les détails de ses réactions avec les acides. Il observa que le fluor attaquait le verre par des fumées obtenues en chauffant lentement un mélange de fluorine et d'acide sulfurique. Les résidus solides qui se trouvaient dans le mélange étaient extraits avec de l'eau, et révélaient la présence de chaux par addition d'ammoniaque. Les fumées combinées avec de l'eau formaient une masse blanche, identifiée comme de la silice. Ainsi, la solution obtenue présentait une réaction acide, que Carl Scheele nomma acide fluorhydrique (HF). Scheele réunit tous les résultats de ses expériences et montra comment identifier cet acide. Le fait que le fluor était capable de graver le verre permit à Jacob Berzelius d'en trouver dans de l'eau en 1822.

Certains chercheurs contestèrent que l'acide fluorhydrique était vraiment un acide. C'est seulement après que l'acide chlorhydrique fut identifié comme un composé d'hydrogène, et la découverte d'un nouvel élément appelé chlore que certains chercheurs pensèrent que l'acide fluorhydrique était lui aussi un composé d'hydrogène, et d'un autre élément aux propriétés proches du chlore. Ils proposèrent de nommer cet élément inconnu fluor, puis phtor (du grec : « destructif »), en raison des propriétés destructives de ses composés. Ce terme de phtor ne fut accepté qu'en grec, russe et quelques autres langues sous l'influence du russe [8].

II.2 Propriétés physiques :

Le fluor est le premier élément de la colonne des halogènes. C'est un gaz jaune verdâtre d'une odeur piquante et irritante, toxique, non combustible mais capable d'oxyder (comburant) dangereusement vite tout ce qui peut brûler dans l'air et même l'eau, le verre ou

le sable ordinaires réagissent dans une atmosphère de fluor. C'est un élément très actif chimiquement, rarement monoatomique.

Un atome de fluor possède 9 électrons qui gravitent autour du noyau, sa configuration électronique peut s'écrire $1s^2 2s^2 2p^5$ ou $[\text{He}](2s)^2(2p)^5$. Sa structure électronique s'écrit $(K)^2(L)^7$. Pour que le fluor respecte la règle de l'octet, il gagne un dixième électron en formant l'ion fluorure F^- pour avoir 8 électrons sur sa couche externe.

La première densité du fluor a été calculée par Henri Moissan à partir d'une expérience où il a recueilli du fluor et de l'air dans un flacon de platine. Henri Moissan a obtenu une densité de 1,264 à 0 °C et 760 mmHg. Il a ensuite calculé la densité théorique en multipliant la densité de l'hydrogène et le poids atomique du fluor, il a trouvé 1,316 [1].

II.3. L'importance des produits fluorés dans notre vie quotidienne

II.3.1. En chimie

L'apport des produits fluorés est considérable dans des domaines divers :

- Les polymères fluorés, comme le Teflon, dont la remarquable résistance à la corrosion a révolutionné certaines utilisations [9] : conditionnement de produits très réactifs, récipients culinaires « n'attachant pas », matériaux pour implantations cardiovasculaires, membranes échangeuses d'ions, traitement de surface de tissus par Gore-Tex.
- Les nouvelles molécules à propriétés hautement sélectives : composés fluorosulfurés utilisés comme stéroïdes, dérivés de l'acide triflique, sucres, vitamines.
- Les milieux superacides servant à la production de carburants à haut indice d'octane.
- Les tensioactifs employés pour la protection des surfaces (tissus, moquettes, cuir) et la lutte contre l'incendie.
- Les matériaux fluorés à propriétés spécifiques : catalyseurs, pigments colorés, capteurs chimiques, biomatériaux [10].
- Les nanocomposites à base de silanes fluorés et de silice, de métal et polymères fluorés à propriétés ultrahydrophobes, de membranes sélectives pour filtration de gaz.
- Les traitements de surface à des fins de protection de notre patrimoine culturel, couches anti-graffiti et anti-reflets, absorbeurs UV, protection automobile.
- Les composantes de batteries, piles à combustible, électrolytes solides à base de conducteurs ioniques

II.3.2. En biologie et médecine,

Il existe des molécules fluorées à propriétés anticancéreuses, anti-inflammatoires, antibiotiques, neuroleptiques ou antihypertenseurs [11-12].

Des matériaux biomimétiques utilisent les propriétés de la fluoroapatite, l'un des principaux constituants de notre squelette. Les substituts fluorés du sang sont utilisés pour les transfusions d'urgence. Les perfluorocarbures servent en chirurgie vitréorétinienne lors d'opérations du décollement de la rétine. Dans la détection précoce des cancers, la tomographie à émission de positrons (TEP) qui utilise un radio-isotope du fluor, le ^{18}F , permet l'obtention d'images de très haute qualité du fonctionnement de nos organes, tissus ou cellules.

II.3.3. En agrochimie

La moitié des molécules à propriétés herbicides, fongicides ou insecticides contiennent un ou plusieurs atomes de fluor.

II.3.4. En microélectronique

Le fluor et les gaz fluorés occupent une place stratégique dans la chaîne de production des composants en silicium, car ils permettent l'élimination de toutes traces d'impuretés à la surface du semi-conducteur qui seraient rédhibitoires pour le bon fonctionnement de nos ordinateurs. Les verres fluorés à base de métaux lourds entrent dans la composition de fibres lasers, d'amplificateurs optiques ou de guides d'ondes pour microlasers en télécommunications [10].

II.3.5. Dans le stockage et la conversion de l'énergie

Le fluor peut être considéré comme la pierre angulaire du cycle nucléaire, car c'est grâce à l'hexafluorure d'uranium (UF_6) que l'enrichissement isotopique en ^{235}U peut être réalisé.

Par ailleurs, les membranes perfluorées de type Nafion® constituent le cœur des piles à combustible les plus performantes [13].

II.4 Trifluorométhane :

Le trifluorométhane ou fluoroforme est un halogénoalcane de formule CHF_3 . Il appartient plus précisément à la famille des trihalogénométhane, qui comporte notamment le chloroforme (trichlorométhane), le bromoforme (trichlorométhane) et l'iodoforme (triiodométhane), ainsi qu'à celle des hydrofluorocarbures (HFC).

C'est un gaz incolore, ininflammable, à l'odeur éthérée, utilisé dans diverses applications de niche, et qui est un sous-produit de la fabrication du Teflon. Il est aussi biologiquement produit en petite quantité, apparemment par décarboxylation de l'acide trifluoroacétique [14].

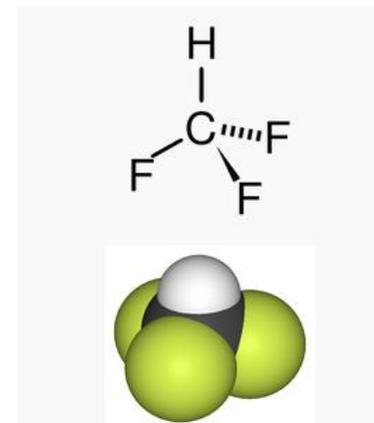


Figure II.1 : structure de CHF_3

II.5 Dichlorofluorométhane :

Le dichlorofluorométhane CHCl_2F , également appelé Fréon 21, Halon 112 ou R21 selon la liste de réfrigérants, est un hydrochlorofluorocarbure (HCFC).

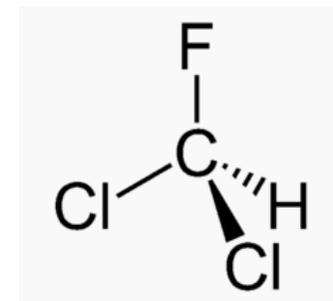


Figure II. 2: structure de CHCl_2F

II.6 Difluorochlorométhane :

Le chlorodifluorométhane, CHClF_2 ou R22 selon la liste de réfrigérants, est un hydrochlorofluorocarbure (HCFC). Il est aussi connu sous les appellations HCFC-22, R22, ou fréon 22, et est utilisé généralement dans des applications de climatisation. Le chlorodifluorométhane a été employé la première fois comme alternative au R11 et R12. Son potentiel d'épuisement de l'ozone est de 0,05, et figure parmi les plus bas pour les haloalkanes contenant du chlore. Toutefois, ce gaz pose un problème vis-à-vis du réchauffement climatique, puisqu'il a un potentiel de réchauffement global (ou PRG) 1 810 fois supérieur à celui du CO_2 [14].

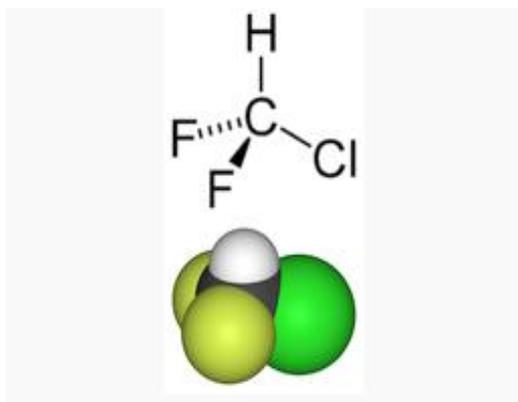


Figure II. 3: structure de CHClF_2

III. La simulation et le simulateur HYSYS

III.1 introduction

La simulation est un outil utilisé dans différents domaines de l'ingénierie et de la recherche en général, permettant d'analyser le comportement d'un système avant de l'implémenter et d'optimiser son fonctionnement en testant différentes solutions et différentes conditions opératoires. Elle s'appuie sur un laboratoire d'un modèle du système, et permet de réaliser des scénarios et d'en déduire le comportement du système physique analysé.

Un modèle n'est pas une représentation exacte de la réalité physique, mais il est seulement apte à restituer les caractéristiques les plus importantes du système analysé.

Il existe plusieurs types de modèles d'un système physique : allant du modèle de représentation qui ne s'appuie que sur des relations mathématiques traduisant les grandes caractéristiques de son fonctionnement, jusqu'au modèle de connaissance complexe issu de la dépendance principalement des objectifs poursuivis [15].

III.2. Principes de fonctionnement et rôle des simulateurs

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

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

- Une base de données des corps purs et un ensemble de méthodes pour estimer les propriétés des mélanges appelés aussi modèles thermodynamiques.

- Un schéma de procédé permettant de décrire les liaisons entre les différentes opérations unitaires constituant l'unité (PFD pour Process Flow Diagram).

- Des modules de calcul des différentes opérations unitaires contenant les équations relatives à leur fonctionnement : réacteur chimique, colonne de distillation, colonne de séparation, échangeurs de chaleur, pertes de charges, etc.

- Un ensemble de méthodes numériques de résolution des équations des modèles.

Avec ce type de logiciel, les ingénieurs peuvent à partir de la donnée des corps purs présents dans le procédé et du schéma de procédé, développer un modèle du processus reposant sur la mise en commun des équations décrivant les différentes opérations unitaires, les réactions chimiques, les propriétés des substances et des mélanges, qui puisse aussi communiquer avec d'autres applications comme Excel, Visual Basic et Matlab,.... [15].

III.3 Modes de fonctionnement des simulateurs:

Il y a deux modes de fonctionnement dans un simulateur : statique (ou stationnaire) et dynamique.

Les simulateurs statiques résolvent des équations statiques qui traduisent le fonctionnement en régime permanent (à l'équilibre), tandis que les simulateurs dynamiques permettent d'évaluer l'évolution des variables dans le temps à partir de la résolution de systèmes d'équations différentielles. Les simulateurs industriels sur la thermodynamique les plus connus mondialement sont :

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

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

Selon Winter (Winter, 1992) les simulateurs dynamiques sont en passe de se substituer aux simulateurs en régime permanent. Par exemple, HYSYS (Hyprotech) peut passer de la simulation d'un régime permanent à celle d'un régime transitoire (dynamique) par un seul « click » sur un bouton.

Néanmoins, tout procédé ne peut être simulé à l'aide de ces simulateurs industriels. En effet, dans le cas de la mise au point de nouveau procédé, il est généralement nécessaire de disposer de son propre simulateur. Le concept est le même : sur la base des propriétés thermodynamiques des corps purs impliqués dans l'opération et des modèles thermodynamiques, il y a résolution des équations de bilan de matière et d'énergie et des relations d'équilibre constituant le modèle. La différence vient du fait que généralement seules les propriétés des corps présents dans le procédé chimique considéré ne sont détaillées

et que l'environnement de développement est moins convivial. On parlera de simulateur dédié (spécifique à un procédé donné). Il a l'avantage de pouvoir avoir une totale maîtrise sur la façon d'écrire les équations du modèle et de les résoudre [15].

III.4 utilisation de la simulation

Les différentes tâches qu'un simulateur de procédé devrait effectuer sont :

- Dans la conception (engineering) :
 - La résolution des bilans de matières et d'énergie.
 - Le dimensionnement des équipements.
 - L'évaluation économique du procédé
 - L'optimisation du procédé
- Dans le suivi des procédés :
 - Réajustement des paramètres de fonctionnement dans le cas des changements de composition de l'alimentation.
 - Détermination de la performance des équipements [16].

III.5 Concepts et caractéristiques du simulateur HYSYS:

III.5.1 Concepts de base du simulateur HYSYS :

HYSYS est un simulateur de conception orientée-objets. Tout changement spécifié sur un élément est répercuté dans tout le modèle.

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

Dans ce qui suit, on définit les principaux concepts de base et vocabulaires associés, qui sont utilisés pendant les étapes de construction d'un modèle dans le simulateur HYSYS (voir la Figure 1):

- « Flowsheet » : c'est un ensemble d'objets « Flowsheet Elements » (courants de matière, d'énergie, d'opérations unitaires, de variables opératoires) qui constituent tout ou une partie du procédé simulé et qui utilisent la même base de données thermodynamique « Fluid Package ». Ce simulateur possède une Architecture Multi-Flowsheet : il n'y a pas de limite par rapport au nombre de Flowsheets. On peut préalablement construire des Flowsheets pour les utiliser dans une autre simulation, ou organiser la description de procédés complexes en le

scindant en sous-Flowsheets qui sont des modèles plus concis (ceci permet de hiérarchiser un processus très complexe). Il possède un certain nombre d'entités particulières : un « Process Flow Diagram » (PFD), un « Workbook ».

- « Fluid Package » : il permet de définir les composants chimiques présents dans le procédé simulé et leurs affecte les propriétés chimiques et physiques contenues dans la base de données des corps purs. Il permet aussi de définir les modèles thermodynamiques qui seront utilisés pour le calcul des propriétés des mélanges et de définir les cinétiques des réactions chimiques mises en jeu dans le procédé.

- « Process Flow Diagram » : ce diagramme permet de visualiser les courants et les opérations unitaires, représentées par des symboles dans le « Flowsheet », ainsi que la connectivité entre les courants, les opérations unitaires et les tableaux des propriétés des courants.

- « Workbook » : il permet d'avoir accès à l'information sur les courants et les opérations unitaires sous forme de tableau de données.

- « Desktop » : c'est l'espace principal de HYSYS pour visualiser les fenêtres lors de la conception.

- « Property view » : il contient l'information décrivant un objet (opération ou courant)

- « Simulation Case » (fichier de simulation) : c'est l'ensemble des « Fluid Packages », « Flowsheets » et « Flowsheet Elements » qui constituent le modèle.

III.5.1.a Environnement de simulation:

Il existe 5 environnements de développement pour manipuler et mettre en forme l'information dans le simulateur (voir la Figure 2) :

- **Environnement « Basis Manager »** : cet environnement permet de créer et modifier le « Fluid Package ».
- **Environnement « Oil Characterization »** : il est utilisé pour caractériser les fluides de type pétrolier
- **Environnement « Main Flowsheet »** : il permet de définir la topologie du Flowsheet principal de la simulation. Il est utilisé pour placer et définir les différents courants, opérations unitaires et « Sub-Flowsheets » qui constituent le procédé simulé.
- **Environnement « Sub-Flowsheet »** : il permet de définir la topologie d'un sous-ensemble particulier du schéma principal (un courant ou une opération particulière et des autres Sub- Flowsheets).

- **Environnement « Column »** : c'est un objet particulier permettant de définir la topologie de l'opération unitaire colonne à distiller. Il possède ses propres « Flowsheet », « Fluid Package », « PFD » et « Workbook ».

Dans la Fig. III.2, les flèches montrent que seuls l'environnement « Column » et le « sub- Flowsheet » sont accessibles depuis l'environnement principal « Main Flowsheet ». Toutefois, en utilisant l'Object Navigator on peut se déplacer directement d'un Flowsheet à autre [15].

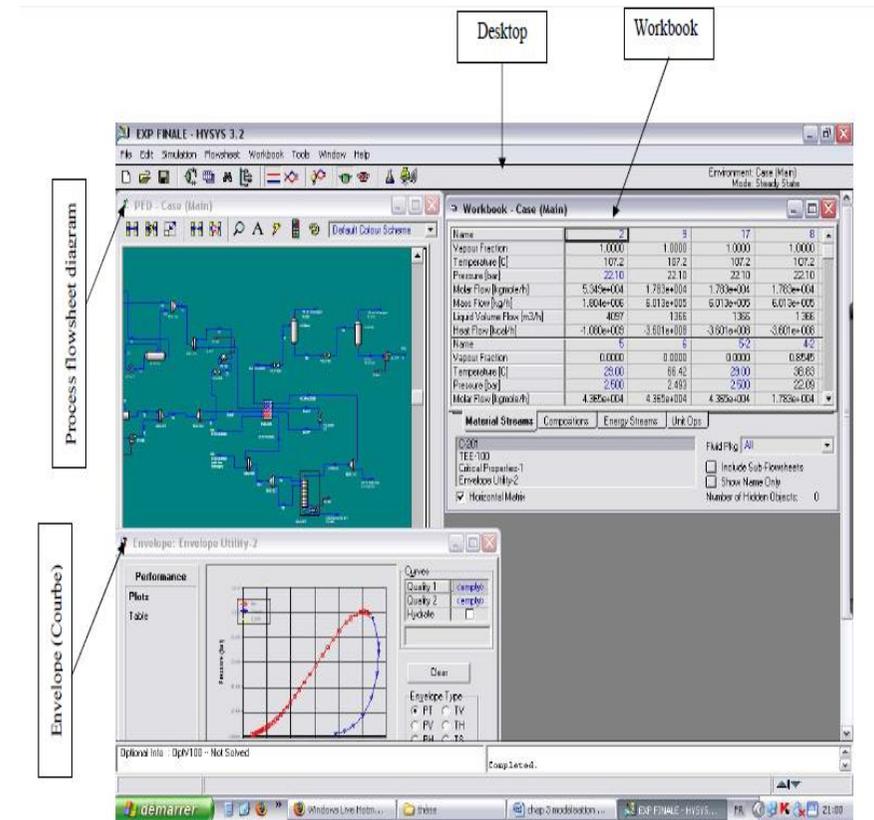


Figure. III.1 : Interface HYSYS m'entrant quelques vocabulaires qui sont utilisés pendant les étapes de construction d'un modèle

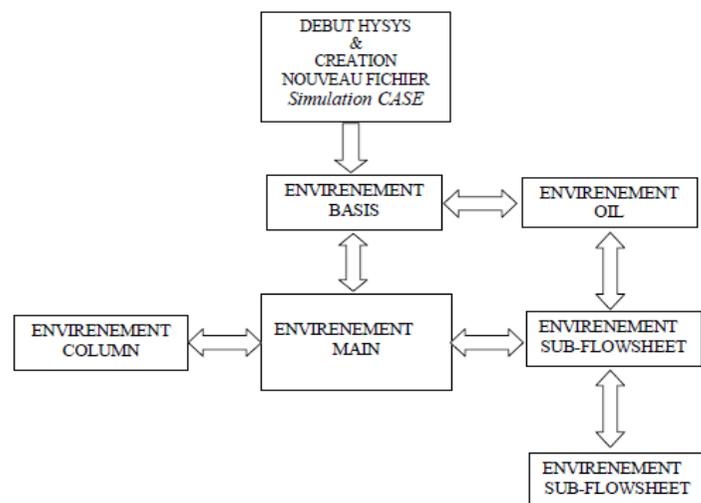


Figure. III.2 : Environnements de développement dans HYSYS

III.5.2 Caractéristiques principales de HYSYS:

Cette partie décrit brièvement les caractéristiques importantes qui font de HYSYS une plate-forme de simulation et de développement très puissant.

- (The Integrated Engineering Environment) : Toutes les applications nécessaires sont utilisées dans un environnement de simulation commun.
- Il intègre la possibilité d’une modélisation dans un état stable ou stationnaire et en régime dynamique : la modélisation dans un état stable et l’optimisation étant utilisées lors de la conception des procédés ; la simulation en régime dynamique étant réservée aux études de contrôlabilité de procédés et au développement de stratégies de contrôle.
- Programmation de HYSYS : HYSYS contient un Internal Macro Engine qui supporte la même syntaxe que Microsoft Visual Basic. On peut automatiser différentes tâches dans HYSYS sans avoir besoin d’un autre programme.

Voici quelques caractéristiques de HYSYS sur la manière dont sont réalisés les calculs:

- Gestion des événements (Event Driven): HYSYS combine le calcul interactif (les calculs sont exécutés automatiquement chaque fois que l’on fournit une nouvelle

information) avec un accès instantané à l’information (à tout moment on peut avoir accès à l’information depuis n’importe quel environnement de simulation).

- Gestion intelligente de l’information (Built-in Intelligence): Les calculs des propriétés thermodynamiques s’effectuent instantanément et automatiquement dès qu’une nouvelle information est disponible.
- Opérations Modulaires: Chaque courant ou unité d’opération peut réaliser tous les calculs nécessaires, en utilisant l’information soit indiquée dans l’opération ou communiquée depuis un courant. L’information est transmise dans les deux directions à travers les Flowsheets.
- Algorithme de résolution non séquentielle : on peut construire des Flowsheets dans n’importe quel ordre.

Voici les caractéristiques de HYSYS sur comment opèrent les environnements :

Lorsque l’on effectue des développements dans un Flowsheet particulier, seul ce Flowsheet et les autres situés au-dessous dans la description hiérarchique, seront modifiés. Par exemple, si l’on considère la Fig. III.3 et que l’on suppose que l’on désire faire des changements dans le SubFlowsheet D, on se place dans son environnement pour y effectuer ces changements. Puisque D est au-dessus de E dans la hiérarchie, tous les Flowsheets autres que D et E resteront inchangés. Dès que les calculs dans D seront effectués, il est possible alors de se déplacer dans l’environnement Main Flowsheet pour recalculer toutes les autres parties du modèle contenues dans les autres SubFlowsheets [15].

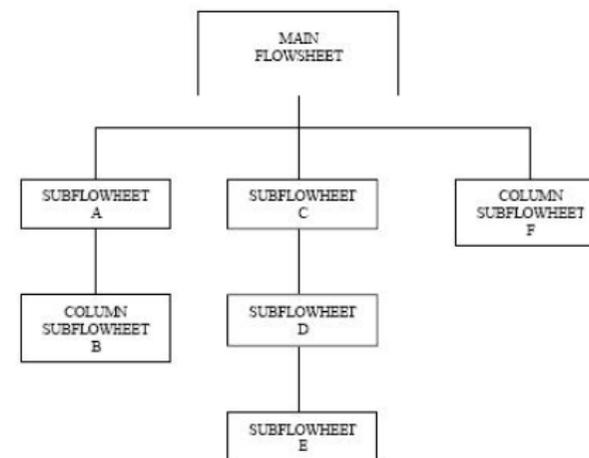


Figure. III.3 : Organigramme des environnements dans la hiérarchie

III .6. Les modèles thermodynamique de HYSYS

III.6.1.Les équations d'état :

Les modèle basés sur les équations d'état (RK, SRK, PR,) ; sont souvent utilisés pour le calcul des systèmes d'hydrocarbures et des systèmes presque idéaux.

Leurs avantages par rapport aux autres modèles résident dans le fait de l'utilisation des coefficients d'interaction-binaire. En générale les équations d'état permettent de calculer l'ensemble des propriétés des produits par rapport à la température et aux fractions molaire.

III.6.2.Equation de PENG-ROBINSON :

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

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

Les termes $a(T)$ et b sont définis comme suit :

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

Le terme $a(T_R)$ présente la même forme générale que dans le cas de l'équation de SOAVE .

$$a(T_R) = [1 + m(1 - \sqrt{T_R})]^2 \quad (\text{III.3})$$

mais la fonction reliant le paramètre m au facteur acentrique ω est différente :

$$m = 0.37464 \omega + 1.54226 - 0.26992 \omega^2 \quad (\text{III.4})$$

Ces équations sont très largement utilisées dans les modèles de simulation, en production et traitement de gaz. L'équation la plus recommandée pour les systèmes d'hydrocarbures est l'équation de PENG-ROBINSON, car elle résout accord avec les valeurs réelles que les autres équations [16].

Tableau III.1 : Domaines d'application de l'équation PR

Equation	Température °C	Pression en Kpa
PR	>-271	< 100000

IV.1. introduction :

L'objectif principal de ce chapitre est de simuler la deuxième partie de l'unité de fabrication des produits fluorés à l'aide de simulateur des procédés ' Aspen HYSYS ' avec les modèles thermodynamique ' Peng-Robinson ' et 'NRTL', les résultats obtenus pour chaque opération sont présentés et discutés dans ce chapitre.

IV.2.L'équipement utilisé dans la simulation :

a)Compresseur (k-100) :

Le compresseur est conçu de manière polytropique, avec un rendement polytropique 77% la pression de refoulement est de $P_{OUT}= 7.668$ bars.

b) Echangeur de chaleur (E-100) :

Le mélange qui va traverser l'échangeur de chaleur coté tubes et refroidi à une température de $T_{OUT}= 30$ °C, il n'y a pas de perte de charge à l'intérieur.

c) Compresseur (k-101) :

Le compresseur est modélisé pour être polytropique, avec un rendement polytropique 77% et la pression de refoulement est de $P_{OUT}= 23$ bars.

d) Condenseur (E-101) :

Condensation des trois gaz à température -90 °C, il n'y a pas de perte de charge à l'intérieur du condenseur.

e) Colonne de distillation (T-100) :

Le mélange liquide des trois composants fluorés rentre dans une colonne de distillation avec une température $T_{IN}= -90$ °C, une pression $P_{IN}=23$ bars et un débit 191.4 kmol /h, cette colonne est composée de 18 étages, l'intervalle de température est de [0°C, 73.78°C]

f) Colonne de distillation (T-101) :

Le résidu de la première colonne rentre dans la deuxième colonne à température $T_{IN}=73.78$ °C, une pression $P_{IN}=22$ bars et un débit 91.28 kmol/h, cette colonne composée à 12 étages, l'intervalle de température est de [55°C, 116.5°C], après la distillation le résidu sort avec un débit 33.15kmol/h, pression $P_{OUT}=19$ bars et une température de $T_{OUT}=116.5$ °C.

IV.3.Description du procédé :

Les diverses étapes du procédé sont rassemblées dans le schéma de principe Fig IV.1

Etape 1- Réaction en phases gazeuse

(Entre l'acide fluorhydrique et le trichlorométhane)

Etape 2- Elimination de l'acide fluorhydrique résiduel

(Par lavage à l'acide sulfurique)

Etape 3- Elimination de l'acide chlorhydrique formé

(Par lavage à l'eau)

Etape 4- Neutralisation des traces d'acide chlorhydrique résiduelles

(Par lavage à la soude)

Etape 5- Séchage

Par passage du mélange gazeux sur une batterie de colonnes des séchages on obtient un mélange gazeux constitué de :

⊕ Dichlorofluorométhane (CH_2Cl_2)

⊕ Difluorochlorométhane (CHF_2Cl)

⊕ Trifluorométhane (CHF_3)

Etape 6- Compression bi-étages (Jusqu'à 23 bars)

Etape 7- Condensation des trois gaz

Dans un échangeur tubulaire alimenté en saumure

Etape 8 -Séparation du mélange liquide

Par rectification en continu dans deux colonnes en série fonctionnant sous pression (22 bars puis 19 bars), les trois produits sont séparés

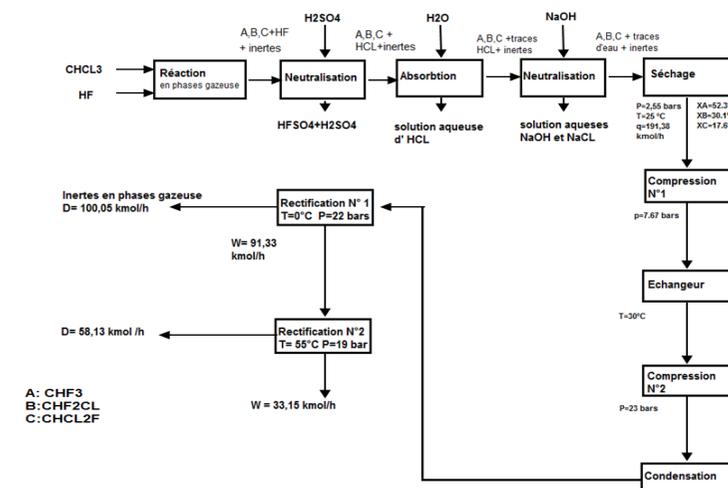


Figure IV.1:Schéma opérationnelle de l'unité de fabrication des produits fluorés

III.4.Simulation avec le modèle thermodynamique ‘ Peng-Robinson ‘

La simulation des étapes (6-7-8) par le logiciel HYSYS donne le schéma suivant :

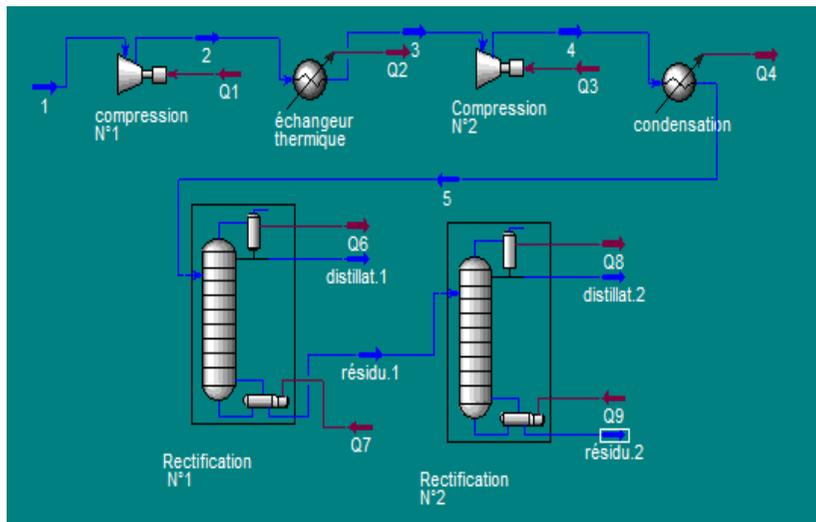


Figure IV.2 : Schéma de la production des produits fluorés par logiciel HYSYS

Etape 6

Le mélange gazeux issu de la tour de séchage, constitué molairement 52,3% de CHF₃, et 30,1% de CHF₂CL, et 17,6% de CHCL₂F, arrive à l’aspiration du premier étage de compresseur à pression P_{IN}= 2.55 bar et en ressort à une pression P_{OUT} 7.66 bars.

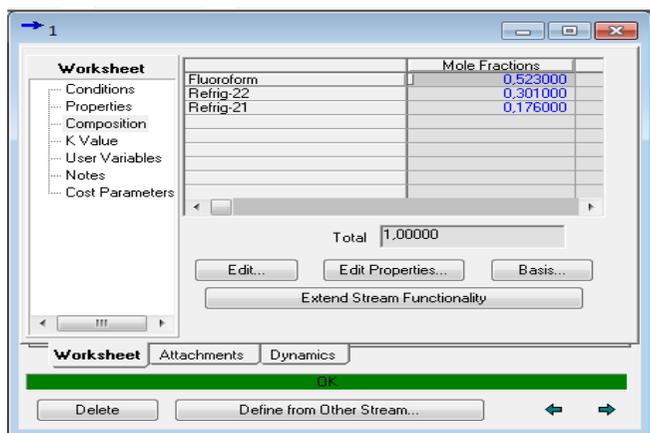


Figure IV.3 : Fenêtre des compositions des produits fluorés

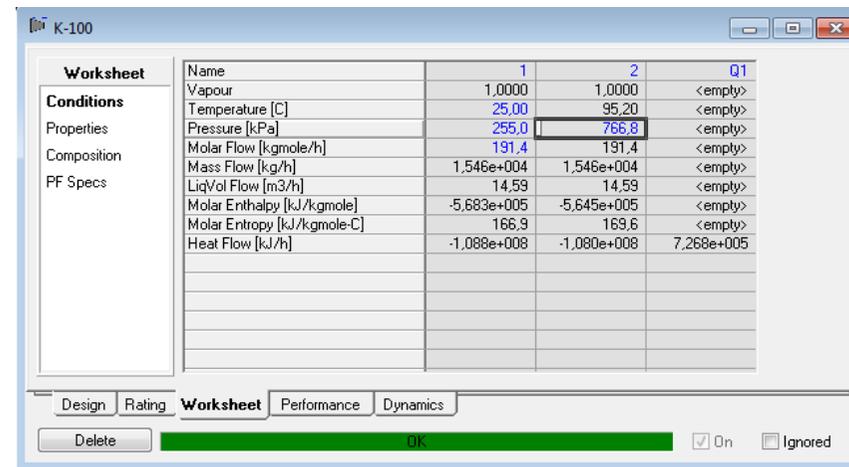


Figure IV.4 : Fenêtre des conditions de 1^{ère} étage de compresseur

Entre les deux étages de compression, un échangeur à faisceau tubulaire fonctionnant à contre courant, permet en effet de refroidir le mélange gazeux. Le gaz rentre dans l’échangeur à T_{IN}= 95,2°C et en ressort à une température de T_{OUT}= 30°C.

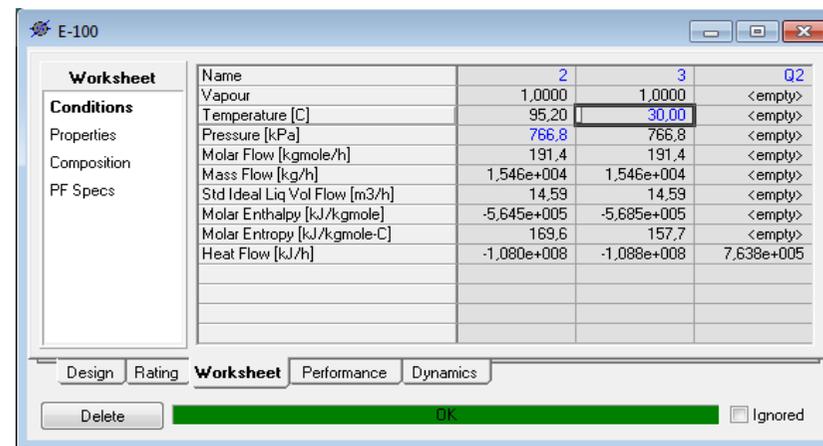


Figure IV.5: Fenêtre des conditions d’échangeur

Le mélange rentre dans le deuxième étage de compresseur à pression $P_{IN}=7.66$ bars et il ressort à $P_{OUT}= 23$ bars.

Worksheet	Name	3	4	Q3
Conditions	Vapour	1,0000	1,0000	<empty>
	Temperature [C]	30,00	104,3	<empty>
Properties	Pressure [kPa]	766,8	2300	<empty>
	Molar Flow [kgmole/h]	191,4	191,4	<empty>
Composition	Mass Flow [kg/h]	1,546e+004	1,546e+004	<empty>
	Liq/Vol Flow [m3/h]	14,59	14,59	<empty>
PF Specs	Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-5,685e+005	-5,650e+005	<empty>
	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	157,7	160,1	<empty>
	Heat Flow [kJ/h]	-1,088e+008	-1,081e+008	6,786e+005

Figure IV.6: Fenêtre des conditions de 2^{ème} étage de compresseur

Etape 7

Le mélange arrive au condenseur à état gazeux à température de $T_{IN}= 104.3$ °C et sort à état liquide à température $T_{OUT}=-90$ °C.

Worksheet	Name	4	5	Q4
Conditions	Vapour	1,0000	0,0000	<empty>
	Temperature [C]	104,3	-90,00	<empty>
Properties	Pressure [kPa]	2300	2300	<empty>
	Molar Flow [kgmole/h]	191,4	191,4	<empty>
Composition	Mass Flow [kg/h]	1,546e+004	1,546e+004	<empty>
	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	14,59	14,59	<empty>
PF Specs	Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-5,650e+005	-5,943e+005	<empty>
	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	160,1	56,86	<empty>
	Heat Flow [kJ/h]	-1,081e+008	-1,137e+008	5,605e+006

Figure IV.7 : Fenêtre des conditions de condenseur

Etape 8

Dans une colonne de distillation à 18 palataux, dans le plateau n°9 on envoie le mélange avec un débit de 191.4 kmol/h, température -90°C et pression 23 bars, cette colonne alimentée par un bouilleur ($T_{\text{bouilleur}} = 73.78$ °C).

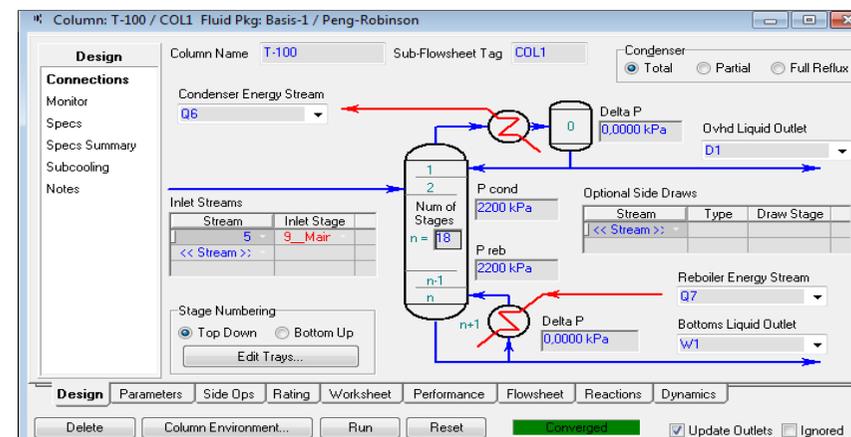


Figure IV.8 : Page de connexion de la première colonne de distillation

En obtient à la tête de la colonne une quantité 99.83% de CHF_3 à température -5°C et un débit de 100.1 kmol /h.

Worksheet	Mole Fractions
Fluoroform	0.998325
Refrig-22	0.001675
Refrig-21	0.000000
Total	1,00000

Figure IV.9 : Fenêtre des compositions des composants de distillat

Le résidu qui sort avec des fractions molaires 0.17% de CHF₃ et 62.93% de CHF₂CL, 36.9% de CHCL₂F à pression 22 bars et température 73.78C et est envoyé vers la deuxième colonne composée de 12 palataux.

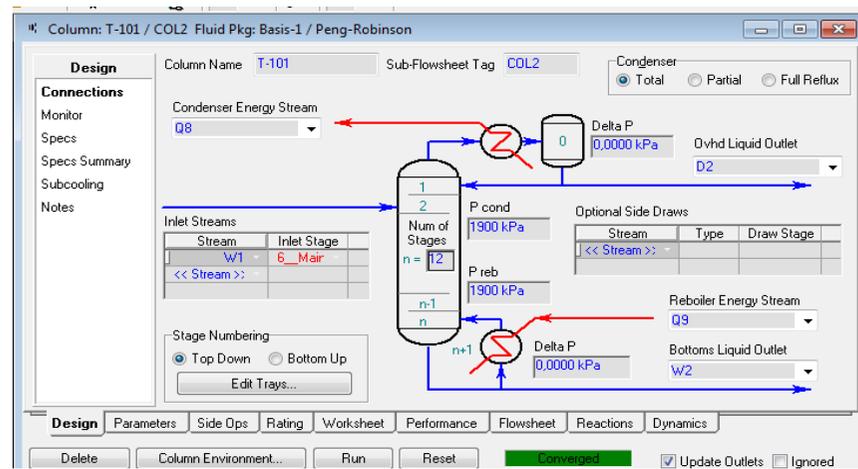


Figure IV.10 : Page de connexion de la deuxième colonne de distillation

On obtient à la tête de la deuxième colonne une quantité 97.90% de CHF₂CL à température 49.38°C et un débit 58.13 kmol/h.

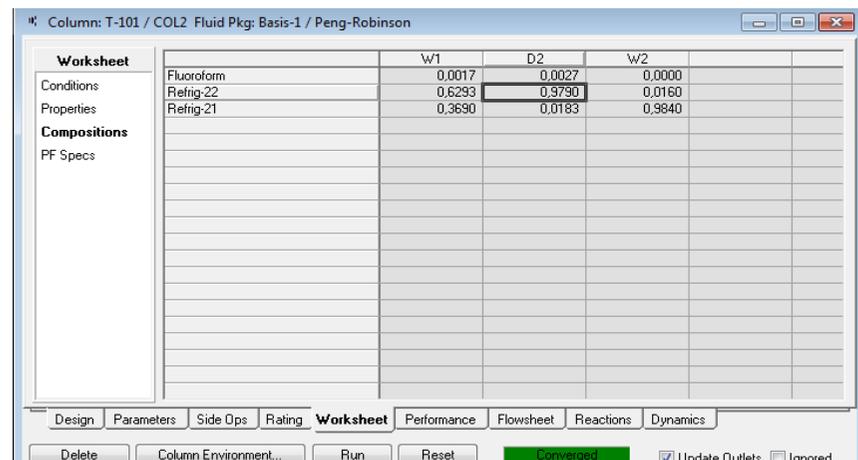


Figure IV.11 : Fenêtre des compositions dans la deuxième colonne de distillation

La quantité de CHCL₂F qui sort avec un résidu de 98.40% et une température de 116.5 °C et un débit de 33.15 kmol/h.

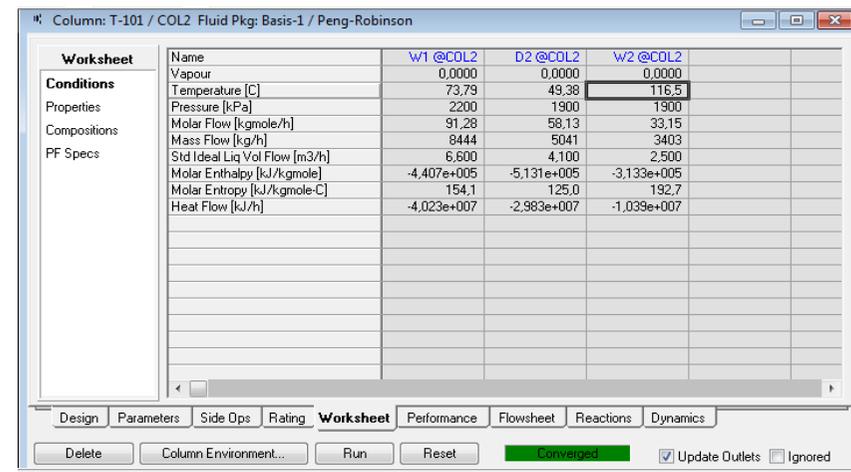


Figure IV.12 : Fenêtre des conditions de la deuxième colonne de distillation

IV.5. Résultat et discussion :

Après l'introduction des différentes données de simulation, le simulateur a convergé vers la solution optimale, dans la partie suivante on présentera les résultats de la simulation.

IV.5.1. Au niveau de la première colonne de distillation

Les profils les plus importants à présenter sont donnés par les figures (IV 13, IV14, IV15, IV16)

- Le profil de pression et de température
- Le profil du débit molaire du liquide et de vapeur
- Le profil des différentes compositions

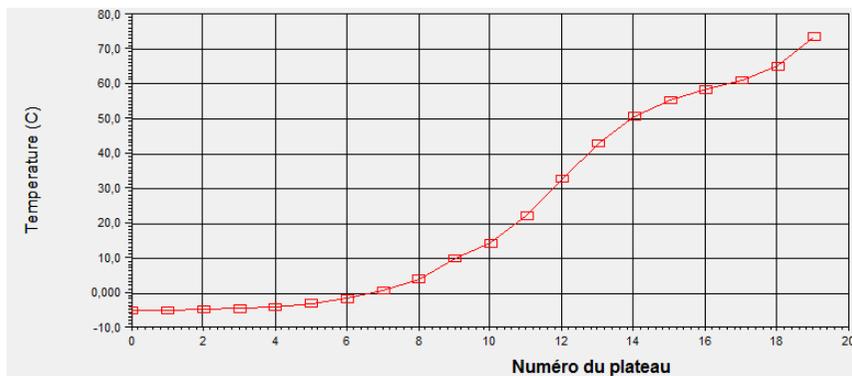


Figure IV.13: Variation de la température dans la première colonne de distillation

La courbe de variation de la température en fonction du numéro de plateau au niveau de la première colonne de distillation.

Le profil de température présente une évaluation normale le long de la colonne, sauf une augmentation légère de la température remarquée au niveau du 8^{ème} plateau jusqu'au 14^{ème} plateau.



Figure IV.14 : Variation des débits molaires dans la première colonne de distillation

La figure ci-dessus présente la variation du débit de liquide et de vapeur en fonction du numéro de plateau.

Le profil du débit liquide et vapeur, présente une évaluation des profils du liquide et vapeur uniforme et parallèle.

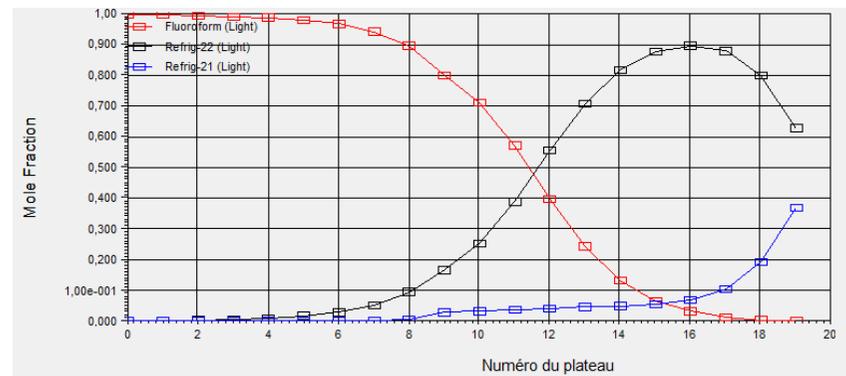


Figure IV.15 : Variation des compositions de la phase liquide dans la première colonne de distillation

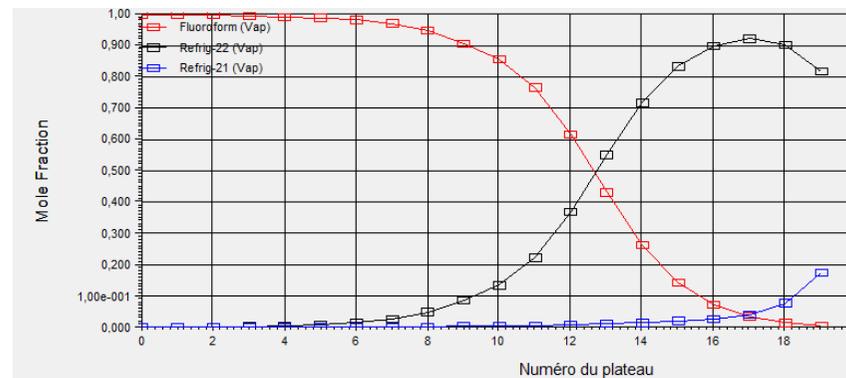


Figure IV.16 : Variation des compositions de la phase vapeur dans la première colonne de distillation

La composition de CHF_3 diminue dans la colonne par contre les autres compositions, la composition de CHF_2Cl augmente, et est plus élevée que le CHCl_2F .

IV.5.2. Au niveau de la deuxième colonne de distillation :

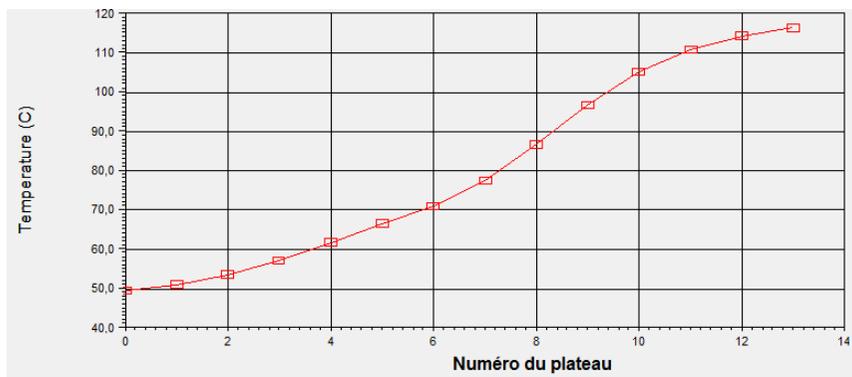


Figure IV.17 : Variation de la température dans la deuxième colonne de distillation

La courbe de variation de la température en fonction du numéro de plateau au niveau de la deuxième colonne de distillation.

Le profil de température présente une évaluation normale le long de la colonne.

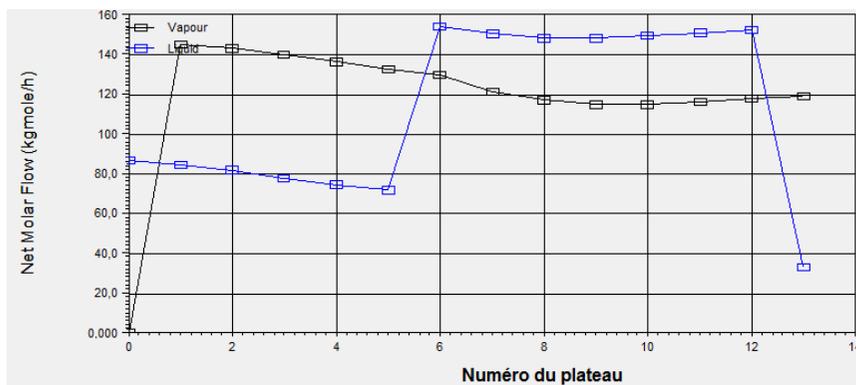


Figure IV.18 : Variation des débits molaires dans la deuxième colonne de distillation

Le profil du débit liquide et vapeur, présente une évaluation des profils du liquide et vapeur uniforme et parallèle.

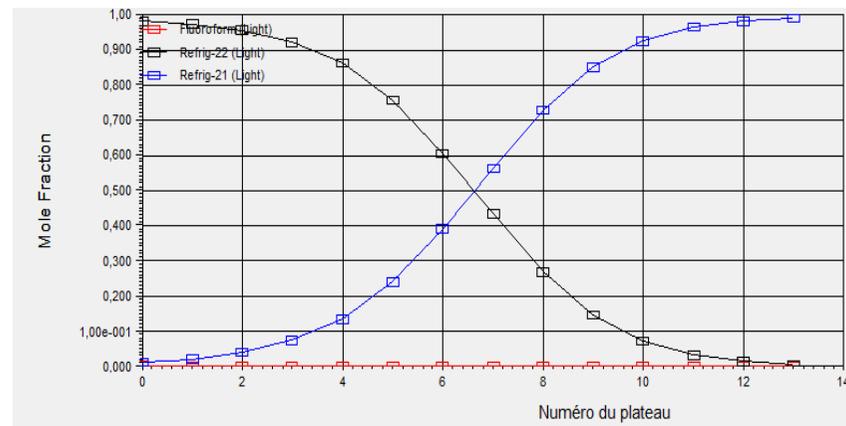


Figure IV.19 : Variation de la composition de la phase liquide dans la deuxième colonne de distillation

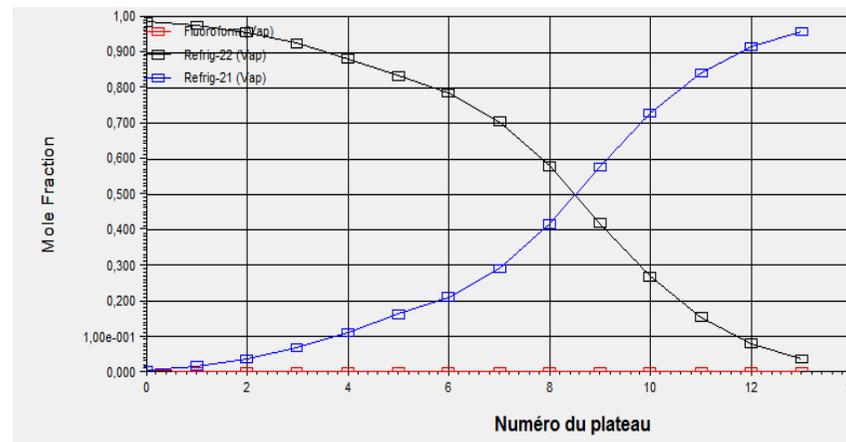


Figure IV.20 : Variation des compositions de la phase vapeur dans la deuxième colonne de distillation

La composition de CHF_2Cl diminue dans la colonne par contre la composition de CHCl_2F augmente.

IV.6.Simulation avec le modèle thermodynamique ‘NRTL’

IV.6.1.Au niveau de la première colonne de distillation :

Les profils les plus importants sont donnés par les figures (IV 21, IV22, IV23, IV24).

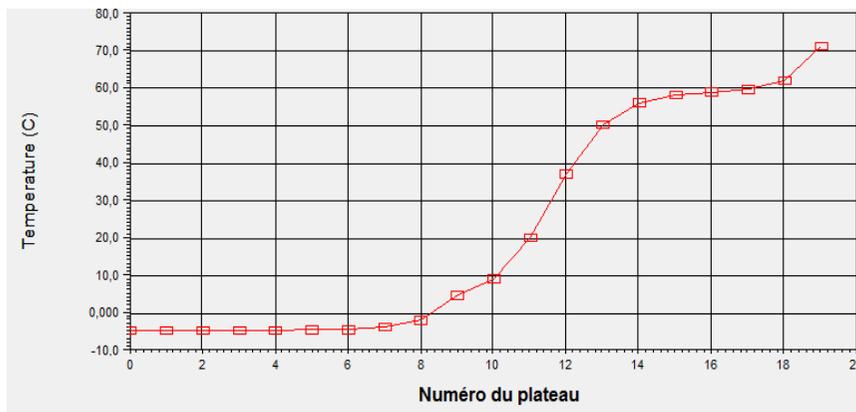


Figure IV.21: Variation de température en fonction de numéro du plateau avec modèle NRTL dans la première colonne

La température maximale $T_{\text{bouilleur}} = 71.36\text{ °C} < T_{\text{bouilleur}}$ avec le modèle thermodynamique ‘Peng-Robinson’ = 73.78°C

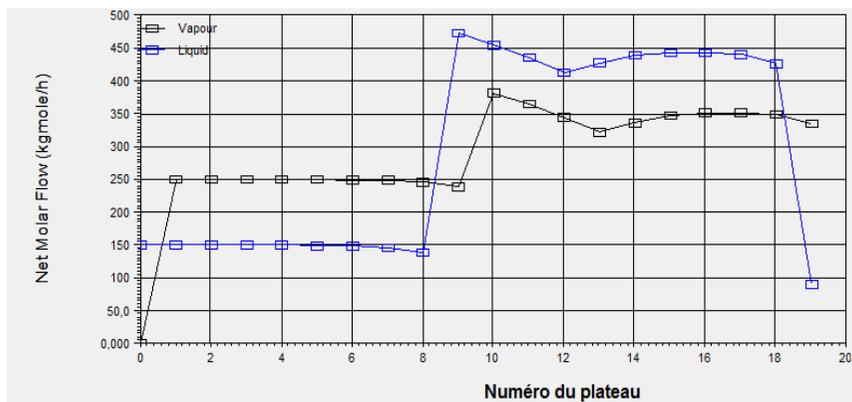


Figure IV.22 : Variation des débits molaires dans la première colonne de distillation avec modèle NRTL

Les débits molaires maximaux de liquide 474.1 kmol /h et de vapeur 382.8kmol /h obtenus par le modèle NRTL sont supérieurs par rapport aux débits obtenus avec le modèle ‘Peng Robinson’ débit maximale de liquide 465.4 kmol/h et le débit maximale de vapeur 374.2 kmol/h.

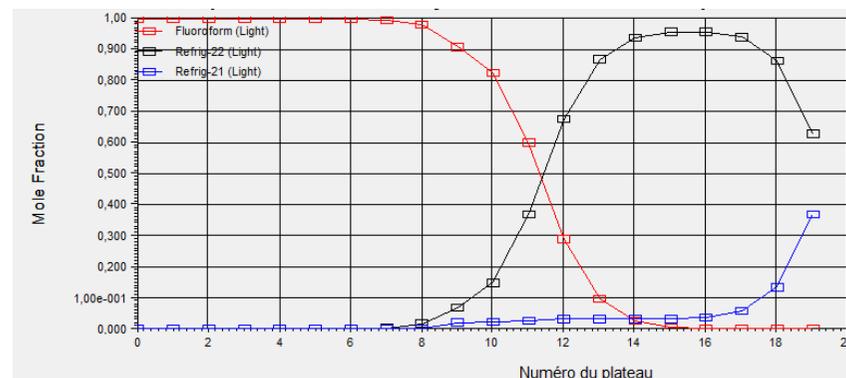


Figure IV.23 : Variation des compositions de la phase liquide dans la première colonne de distillation avec modèle NRTL

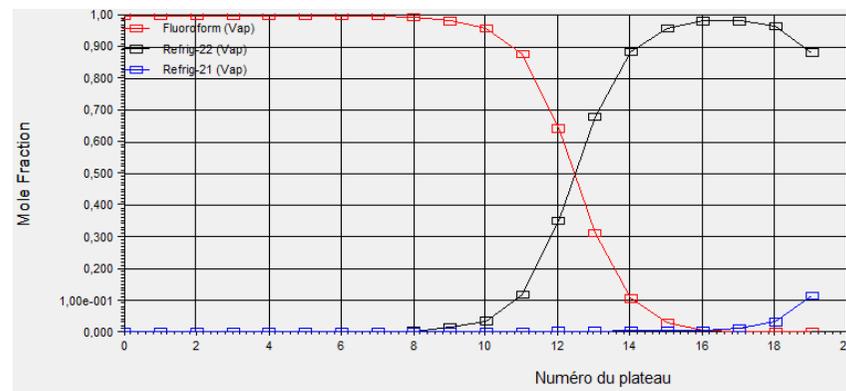


Figure IV.24 : Variation des compositions de la phase vapeur dans la première colonne de distillation avec modèle NRTL

La quantité de CHF₃ distillée complètement dans la première colonne de distillation.

Tableau IV 1 : Les fractions molaires avec les modèles thermodynamiques PR et NRTL au niveau de la 1^{ère} colonne

Première colonne fonctionnant à 22 bars				
Constituant	Modèle thermodynamique PR		Modèle thermodynamique NRTL	
	Fraction molaire de distillat	Fraction molaire de résidu	Fraction molaire de distillat	Fraction molaire de résidu
CHF ₃	0.9983	0.0017	1	0
CHF ₂ CL	0.0017	0.6293	0	0.631
CHCL ₂ F	0	0.3690	0	0.369

IV.6.2. Au niveau de la deuxième colonne de distillation :



Figure IV.25 : Variation de température en fonction de numéro du plateau avec modèle NRTL dans la deuxième colonne

La température maximale $T_{\text{bouilleur}} = 117.6 \text{ }^\circ\text{C} > T_{\text{bouilleur}}$ avec le modèle thermodynamique ‘PR’ 116.5°C

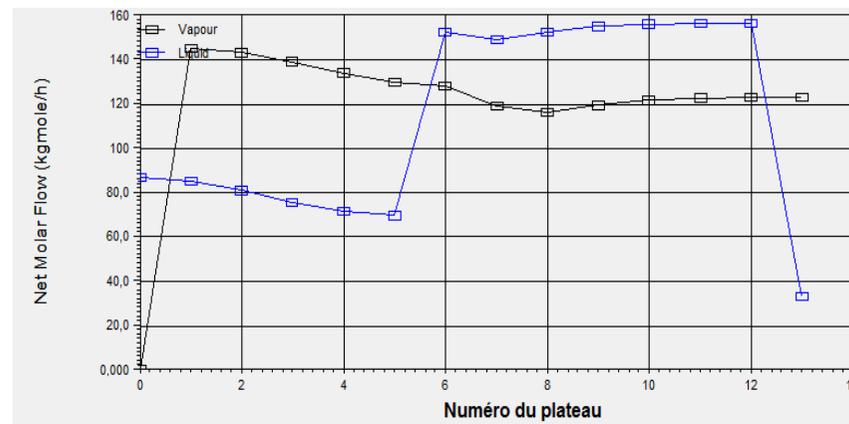


Figure IV.26 : Variation des débits molaires dans la deuxième colonne de distillation avec modèle NRTL

Les débits molaire maximale de liquide 152.3 kmol /h et de vapeur 145.3 kmol /h sont inférieure par rapport aux débits obtenus avec le modèle ‘ Peng Robinson ‘ débit maximale de liquide 152.4kmol/h et le débit maximale de vapeur 145 kmol/h.

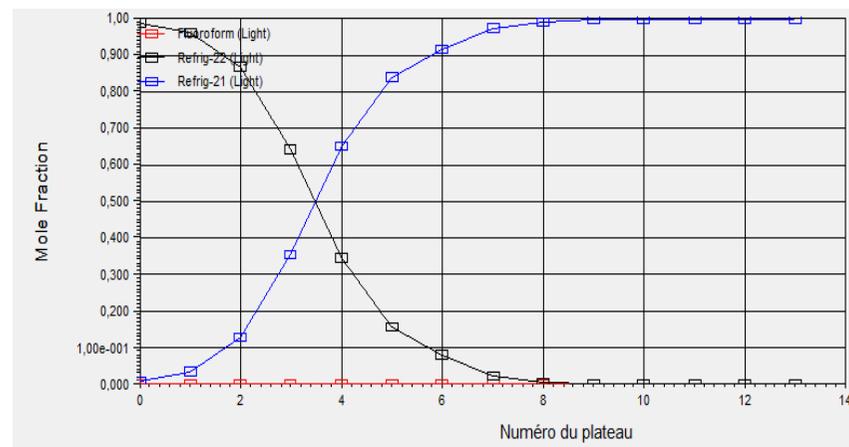


Figure IV.27 : Variation des compositions de la phase liquide dan la deuxième colonne de distillation avec modèle NRTL

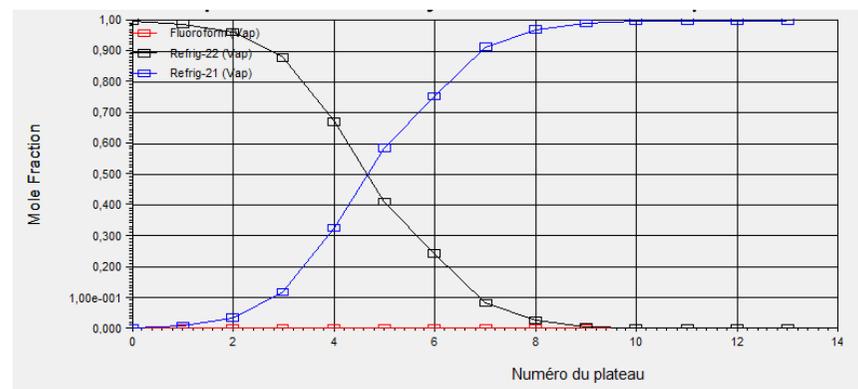


Figure IV.28 : Variation des compositions de la phase vapeur dans la deuxième colonne de distillation avec modèle NRTL

La quantité de CHCl_2F sort avec une fraction de 99.97% dans le résidu de la deuxième colonne de distillation.

Tableau IV 2 : Les fractions molaires avec les modèles thermodynamiques PR et NRTL au niveau de la 2^{ème} colonne

Deuxième colonne fonctionnant à 19 bars				
Constituant	Modèle thermodynamique PR		Modèle thermodynamique NRTL	
	Fraction molaire de distillat	Fraction molaire de résidu	Fraction molaire de distillat	Fraction molaire de résidu
CHF_3	0.0027	0	0.00004	0
CHF_2CL	0.9790	0.0160	0.99094	0.00023
CHCl_2F	0.0183	0.9840	0.00902	0.99977

IV.7.Optimisation du procédé :

Dans cette section, nous étudions l'influence des paramètres opératoires les plus importants tels que : la température, la pression, le débit, le nombre d'étage et la position de l'étage d'alimentation et taux du reflux sur le fonctionnement de la deuxième colonne de distillation. Donc l'objectif est d'analyser la sensibilité et optimisé les paramètres opératoires

de la colonne. Pendant l'analyse de sensibilité tous les paramètres sont restés constants sauf le paramètre examiné.

IV.7.1.Influence de la pression :

Le choix de la pression de marche d'une colonne résulte d'un choix économique, la pression est celle qui donne des quantités de chaleur faible au niveau de rebouilleur.

D'après le tableau IV.3, la pression choisie (19 bars), on une production maximum de CHF_2CL avec une quantité d'énergie minimale au niveau de rebouilleur.

Tableau IV.3 : Influence de la pression sur le fonctionnement de la deuxième colonne de distillation

Pression (bars)	Modèle PR		Modèle NRTL	
	Taux de récupération de CHF_2CL (%)	Q rebouilleur (kj/h)	Taux de récupération de CHF_2CL (%)	Q rebouilleur (kj/h)
19	97.90	$2.011 \cdot 10^6$	99.09	$2.298 \cdot 10^6$
25	97.37	$2.086 \cdot 10^6$	99.09	$2.364 \cdot 10^6$
30	96.84	$2.146 \cdot 10^6$	99.08	$2.415 \cdot 10^6$

IV.7.2.Influence de la température d'alimentation :

Comme l'indique le tableau IV.5, le choix de la température d'alimentation 70°C est conditionné par le taux de récupération désiré ainsi que la quantité de chaleur de rebouilleur est minimale.

Tableau IV.5 : Influence de la position d'alimentation sur le fonctionnement de la deuxième colonne de distillation

Température (°C)	Modèle PR		Modèle NRTL	
	Taux de récupération de CHF_2CL (%)	Q rebouilleur (kj/h)	Taux de récupération de CHF_2CL (%)	Q rebouilleur (kj/h)
70	97.93	$2.056 \cdot 10^6$	99.08	$2.432 \cdot 10^6$
80	97.09	$1.409 \cdot 10^6$	99.07	$1.662 \cdot 10^6$
90	92.30	$6.345 \cdot 10^5$	98.95	$9.948 \cdot 10^5$
100	91.45	$5.705 \cdot 10^5$	98.44	$7.437 \cdot 10^5$

IV.7.3. Influence du nombre de plateaux :

Le nombre de plateaux de cette colonne (24 avec modèle de PR, et 18 avec modèle de NRTL) est choisi d'après le tableau IV.6 de telle sorte qu'il assure la fonction pour laquelle cette colonne est employée un taux des récupérations de CHF₂CL élevé, consommation d'énergie minimum.

Tableau IV.6 : Influence du nombre de plateau sur le fonctionnement de la deuxième colonne de distillation

Nombre de Plateaux	Modèle PR		Modèle NRTL	
	Taux de récupération de CHF ₂ CL (%)	Q rebouilleur (kj/h)	Taux de récupération de CHF ₂ CL (%)	Q rebouilleur (kj/h)
6	93.45	2.052.10 ⁶	97.71	2.421.10 ⁶
12	97.90	2.011 .10 ⁶	99 .09	2.415.10 ⁶
18	98.72	2.003.10 ⁶	99.10	2.415.10 ⁶
24	98.79	2.002.10 ⁶	99.10	2.415.10 ⁶

IV.7.4. Influence de la position d'alimentation :

Le tableau IV.7 présente un minimum au niveau 6^{ème} plateau ; l'alimentation au niveau de ce plateau donne le plus grand Taux de récupération de CHF₂CL d'où ce plateau correspond au plateau optimal d'alimentation.

Tableau IV.7 : Influence de la position d'alimentation sur le fonctionnement de la deuxième colonne de distillation

Plateau D'alimentation	Modèle PR		Modèle NRTL	
	Taux de récupération de CHF ₂ CL (%)	Q rebouilleur (kj/h)	Taux de récupération de CHF ₂ CL (%)	Q rebouilleur (kj/h)
3	96.30	2.026.10 ⁶	99.08	2.415.10 ⁶
6	97.90	2.011 .10 ⁶	99 .09	2.415.10 ⁶
9	96.25	2.026.10 ⁶	98.76	2.416.10 ⁶
12	88.55	2.096.10 ⁶	93.49	2.444.10 ⁶

IV.7.5. Influence du taux de reflux :

La quantité de chaleur minimale au niveau du rebouilleur nous a permis de choisir le taux de reflux de 1.5.

Tableau IV.8 : Influence du taux de reflux sur le fonctionnement de la deuxième colonne de distillation

Taux de reflux	Modèle PR		Modèle NRTL	
	Taux de récupération de CHF ₂ CL (%)	Q rebouilleur (kj/h)	Taux de récupération de CHF ₂ CL (%)	Q rebouilleur (kj/h)
1	96.31	1.621.10 ⁶	99.06	1.839.10 ⁶
1.2	97.21	1.776 .10 ⁶	99 .08	2.023.10 ⁶
1.4	97.72	1.932.10 ⁶	99.091	2.206.10 ⁶
1.5	97.90	2.011.10 ⁶	99.093	2.289.10 ⁶

Conclusion générale

Dans cette étude nous avons simulé et optimisé une unité de fabrication des produits fluorés

La simulation a été faite à l'aide d'un simulateur dynamique mondialement connu et très utilisé dans l'industrie. Ce choix, même s'il a nécessité le besoin de s'investir sur la prise en main, la compréhension, la maîtrise, l'adaptation d'un outil aussi puissant qu'HYSYS, a permis de démontrer la faisabilité de la procédure développée allée à l'utilisation de simulateurs de procédés commerciaux et donc, son caractère générique .

Dans cette étude nous avons montré l'influence des différents paramètres opératoires de fonctionnement de l'unité de fabrication des produits fluorés sur le taux maximale de production et la séparation des trois produits fluorés. au niveau de la deuxième colonne de distillation nous avons trouvé les paramètres optimales (pression 19 bars , température d'alimentation 70°C , nombre de plateaux 18, la position d'alimentation (plateau N° 6), taux de reflux 1.5) avec les deux modèles thermodynamique **PR** et **NRTL** .

En fin nous recommandons de :

- Faire une étude dynamique sur ce procédé et déterminer les nouveaux paramètres opératoires avec deux modèles thermodynamique PR et NRTL.
- Faire une étude économique comparative à fin de mettre en évidence la rentabilité de ce procédé par rapport à d'autres procédés.

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] Page web -http://fr.wikipedia.org/wiki/Fluor#cite_note-12-12/02/2015
- [2] Arthur D. Little. *d'opération unitaire*. del Massachussets Institute of Technology (M.I.T), Cambridge 1915.
- [3] W. K. Lewis and W. H. McAdams, engineering *Principles of Chemical*. (M.I.T), Cambridge 1924.
- [4] Bird R. B., Stewart E. W., *Transport Phenomena*. J. Wiley, New York, 1964.
- [5] Emilian Koller, *Aide-mémoire Génie chimique*, Dunod, Paris 2009.
- [6] Gherbia said, kharfi Mostafa, *La distillation*, mémoire de licence, Université Mohamed Khider Biskra, département de chimie industrielle, 2013.
- [7] P. Wuithier, *le pétrole Raffinage et génie chimique*, éditions Tchinp 1965.
- [8] Peter Meiers, *The discovery of fluoride and fluorine*, www.fluoride-history.de- 2014.
- [9] Améduri B., Boutevin B., *Well-Architected Fluoropolymers*, Elsevier, Amsterdam, 2004.
- [10] Advanced Inorganic Fluorides: Synthesis, Characterization and Applications, T. Nakajima, A. Tressaud, B. Zemva (eds), Elsevier, 2000.
- [11] Bégué J.-P., Bonnet-Delpon D., *Chimie bioorganique et médicinale du fluor*, EDP Sciences, 2005.
- [12] I. Ojima, J.R. McCarthy, J.T. Welch (eds), *Biomedical Frontiers in Fluorine Chemistry*, American Chemical Society, 1996.
- [13] T. Nakajima, H. Groult (eds), *Fluorinated Materials for Energy Storage*, Elsevier B.V., 2005.
- [14] Page web -<http://fr.wikipedia.org/wiki/> - 20 /2/2015
- [15] Miles Adel, mémoire de magister, *Optimisation des cycles de liquéfaction du Gaz Naturel*, université Montouri – Constatine, département de génie mécanique, 2009.
- [16] Djebbari Abdel basset, mémoire de Master, *Simulation d'une unité de production de méthanol à laide de l'Aspen HYSYS*, Université Mohamed Khider Biskra, département de chimie industrielle, 2014.