

## EXEMPLE D'APPLICATION DE PROSIMPLUS

### EXEMPLE SIMPLE

#### INTERET DE L'EXEMPLE

L'intérêt principal de cet exemple simple est qu'il permet d'aborder la simulation de procédés et ses principaux concepts : constituants mis en jeu, modèle thermodynamique, opérations unitaires et leurs paramètres opératoires, boucles de recyclage, etc.

Le point particulier qui est détaillé au niveau de cet exemple est la notion de boucle de recyclage et les principes de l'approche modulaire simultanée mise en œuvre dans ProSimPlus.

<b>DIFFUSION</b>	<input checked="" type="checkbox"/> Libre-Internet	<input type="checkbox"/> Réservé aux clients ProSim	<input type="checkbox"/> Restreinte	<input type="checkbox"/> Confidentiel
------------------	--	---	-------------------------------------	---------------------------------------

<b>FICHIER PROSIMPLUS CORRESPONDANT</b>	<i>PSPS_E01_FR ExempleSimple.pmp3</i>
---	---------------------------------------

*Il est rappelé au lecteur que ce cas d'utilisation est un exemple et ne doit pas être utilisé à d'autres fins. Bien que cet exemple soit basé sur un cas réel il ne doit pas être considéré comme un modèle de ce type de procédé et les données utilisées ne sont pas toujours les plus exactes disponibles. ProSim ne pourra en aucun cas être tenu pour responsable de l'application qui pourra être faite des calculs basés sur cet exemple*

## TABLE DES MATIÈRES

<b>1. MODELISATION DU PROCEDE</b>	<b>3</b>
1.1. Présentation du procédé	3
1.2. Schéma du procédé	3
1.3. Constituants	4
1.4. Modèle thermodynamique	4
1.5. Conditions opératoires	4
1.6. "Trucs et astuces"	5
<b>2. RESULTATS</b>	<b>8</b>
2.1. Commentaires sur les résultats	8
2.2. Bilans matière et énergie	8
<b>3. BIBLIOGRAPHIE</b>	<b>9</b>

# 1. MODELISATION DU PROCÉDE

## 1.1. Présentation du procédé

Cet exemple très simple est extrait de [1]. Dans ce procédé, un mélange d'hydrocarbures (courant C1) est refroidi jusqu'à 15 °C, mélangé au courant de recyclage (courant C8), détendu de 0,3 atm dans une vanne (non représentée) puis envoyé dans un ballon de séparation de phases (S101, courant C3). La phase vapeur sortant du ballon de séparation (courant C5) est dirigée vers un condenseur flash (S102) où elle est refroidie jusqu'à -60 °C et détendue jusqu'à 25 atm. Les condensats (courant C7) sont repris par une pompe (P101) qui les porte à 75 atm pour les recycler à la sortie du premier échangeur. Les produits sont la phase liquide du ballon de séparation (S101, courant C4) riche en constituants les plus lourds et la phase non condensée dans le condenseur (S101, courant C6) riche en constituants les plus légers.

On notera que la vanne de détente est simulée avec le ballon de séparation afin de réduire le nombre de modules. On aurait pu tout aussi bien décrire la vanne puis le ballon de séparation séparément. Il est en effet fréquent au niveau de la simulation d'un procédé qu'il n'y ait pas correspondance entre l'équipement physique et le module de simulation. Dans une première phase on se contente généralement de représenter les phénomènes mis en jeu sans soucis des équipements dans lesquels ils seront réalisés sur l'unité industrielle.

## 1.2. Schéma du procédé

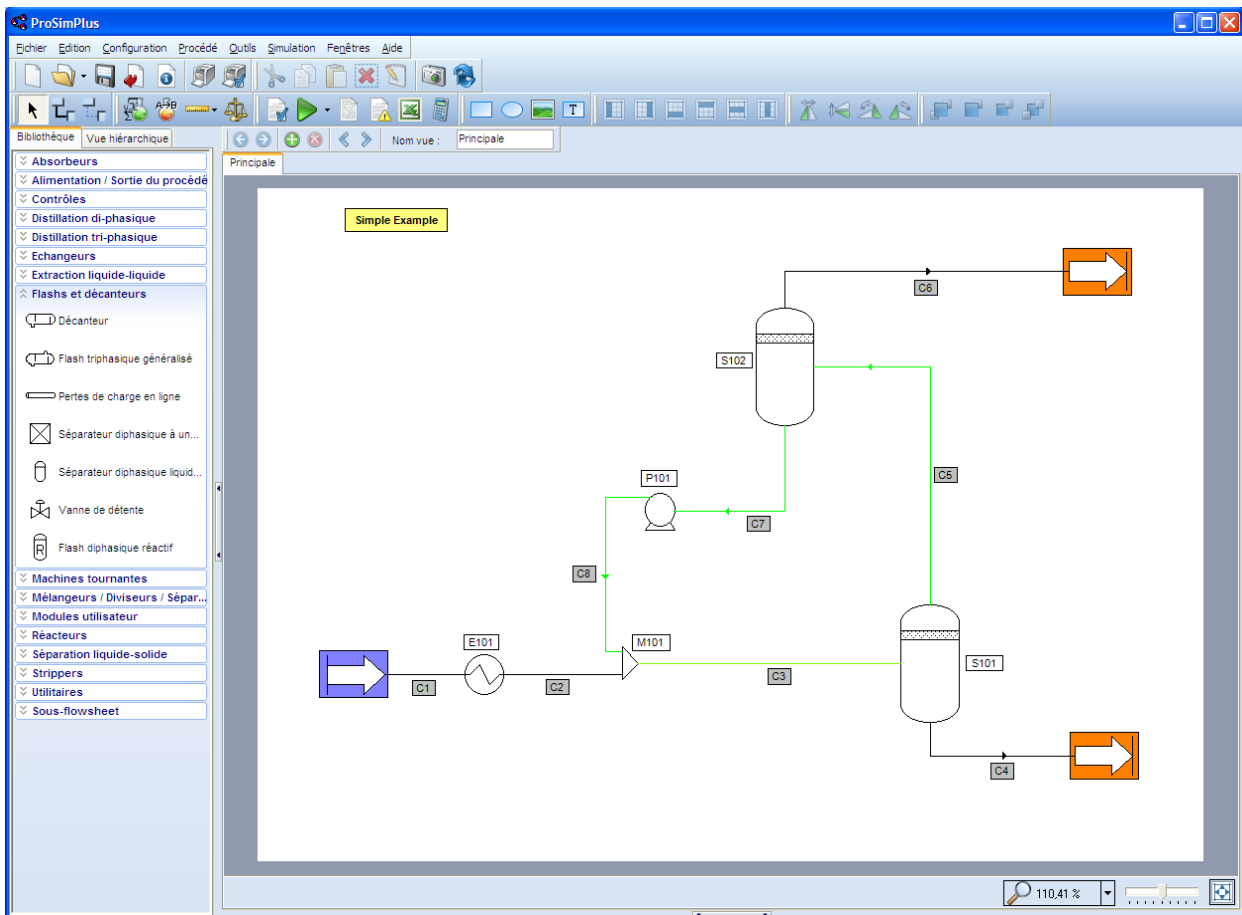


Schéma du procédé

### 1.3. Constituants

Les constituants pris en considération dans la simulation sont extraits de la base standard livrée avec les logiciels ProSim. Ces constituants sont les suivants :

- ❖ Azote
- ❖ Méthane
- ❖ Éthane
- ❖ Propane
- ❖ N-Butane
- ❖ N-Pentane
- ❖ N-Hexane
- ❖ N-Heptane
- ❖ N-Octane

### 1.4. Modèle thermodynamique

Compte tenu de la nature des constituants en présence (essentiellement des alcanes), le modèle thermodynamique utilisé pour la représentation des équilibres entre phases et les calculs d'enthalpies est l'équation d'état cubique de Soave Redlich et Kwong (SRK) [2] avec les paramètres d'interaction binaire extraits de la base fournie avec les logiciels ProSim.

### 1.5. Conditions opératoires

- ✓ Alimentation du procédé

	<i>Alimentation C1</i>
Azote (kmol /hr)	9.0
Méthane (kmol /hr)	41.7
Éthane (kmol /hr)	11.2
Propane (kmol /hr)	6.2
N-Butane (kmol /hr)	5.4
N-Pentane (kmol /hr)	3.0
N-Hexane (kmol /hr)	8.1
N-Heptane (kmol /hr)	13.3
N-Octane (kmol /hr)	2.1
Température (°C)	40
Pression (Atm)	75

## ✓ Échangeur E101

<i>Paramètres de fonctionnement</i>	<i>Valeur</i>
Type	Consignateur de température
Température de sortie (°C)	15

## ✓ Flash S101

<i>Paramètres de fonctionnement</i>	<i>Valeur</i>
Type de séparateur	Diphase liquide-vapeur
Mode de fonctionnement	Adiabatique
Chute de pression (atm)	0.3

## ✓ Flash S102

<i>Paramètres de fonctionnement</i>	<i>Valeur</i>
Type de séparateur	Diphase liquide-vapeur
Mode de fonctionnement	Température et pression fixées
Température de sortie (°C)	- 60
Pression de sortie (atm)	25

## ✓ Pompe P101

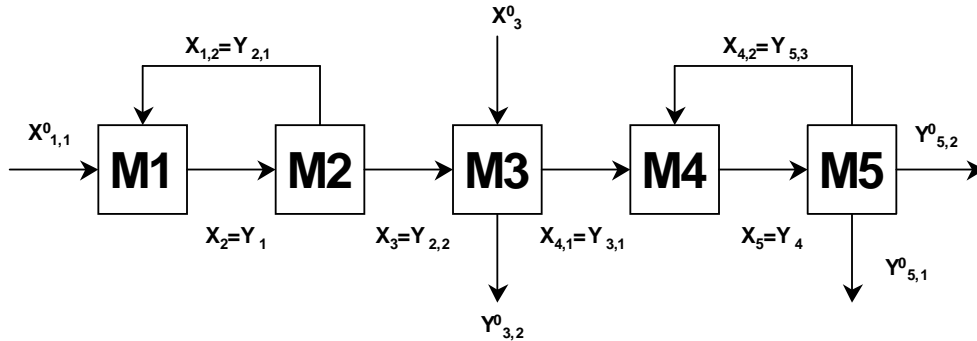
<i>Paramètres de fonctionnement</i>	<i>Valeur</i>
Pression de sortie (atm)	75
Efficacité volumétrique	65%

## 1.6. "Trucs et astuces"

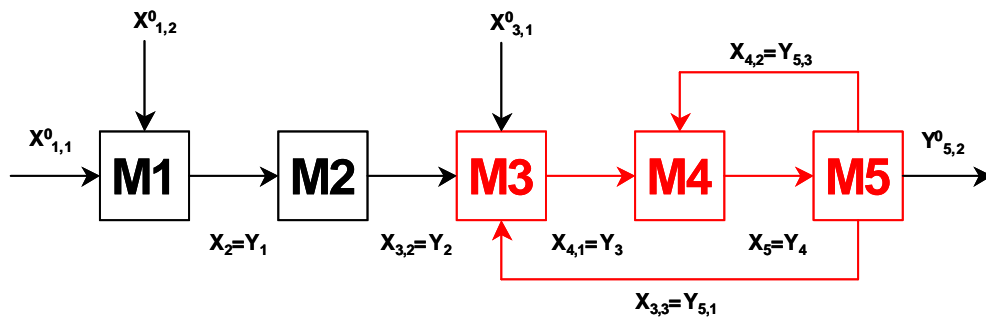
Le simulateur ProSimPlus utilise l'approche modulaire simultanée [3]. Cette méthode, dérivée de l'approche modulaire séquentielle, effectue le calcul de l'ensemble des équipements du flowsheet en respectant une séquence d'appel des modules. Au niveau de chaque module, connaissant les courants entrants et les paramètres opératoires, le module calcule les courants de sortie. Cette approche est basée sur une décomposition du système d'équations représentant le procédé. La présence de recyclage(s) introduit une difficulté quant à la génération de cette séquence de calcul.

Rappelons que le diagramme de simulation représente un graphe orienté dans lequel chaque nœud correspond à un module et chaque arc à l'ensemble des variables d'un courant. L'orientation des arcs est définie par le sens de circulation de l'information dans le diagramme. Les techniques classiques pour la décomposition des systèmes

ceux peuvent alors directement s'appliquer à de tels graphes et permettent en particulier de mettre en évidence les sous-systèmes qui ne peuvent pas être décomposés directement, appelés réseaux cycliques maximaux. Un réseau cyclique maximal (RCM) est défini comme un ensemble de modules reliés par des courants formant un (ou plusieurs) cycle(s) non inclus(s) dans un autre cycle. Deux exemples de graphes et les RCMs correspondants sont présentés ci-après.



Exemple à 2 RCMs : (M1, M2) et (M4, M5)



Exemple à 1 RCM : (M3, M4, M5)

Les RCMs peuvent alors être résolus séquentiellement, les uns à la suite des autres suivant un ordre qui suit le sens de circulation des flux.

Il convient de noter que pour un même graphe, il y a multiplicité de solutions et que le choix d'un ensemble de "courants coupés" repose généralement sur des heuristiques. Finalement, une séquence de calcul est générée pour l'ensemble de courants coupés retenu. A titre d'illustration, pour le deuxième exemple présenté ci-dessus, la séquence de calcul associée aux courants coupés  $X_{4,2}$  et  $X_{3,3}$  est la suivante : M1, M2, (M3, M4, M5). Le choix du courant coupé  $X_5$  conduit quant à lui à la séquence : M1, M2, (M5, M3, M4). Des parenthèses ont été utilisées pour encadrer les RCMs car chaque RCM nécessite la mise en œuvre d'un processus itératif pour atteindre la convergence.

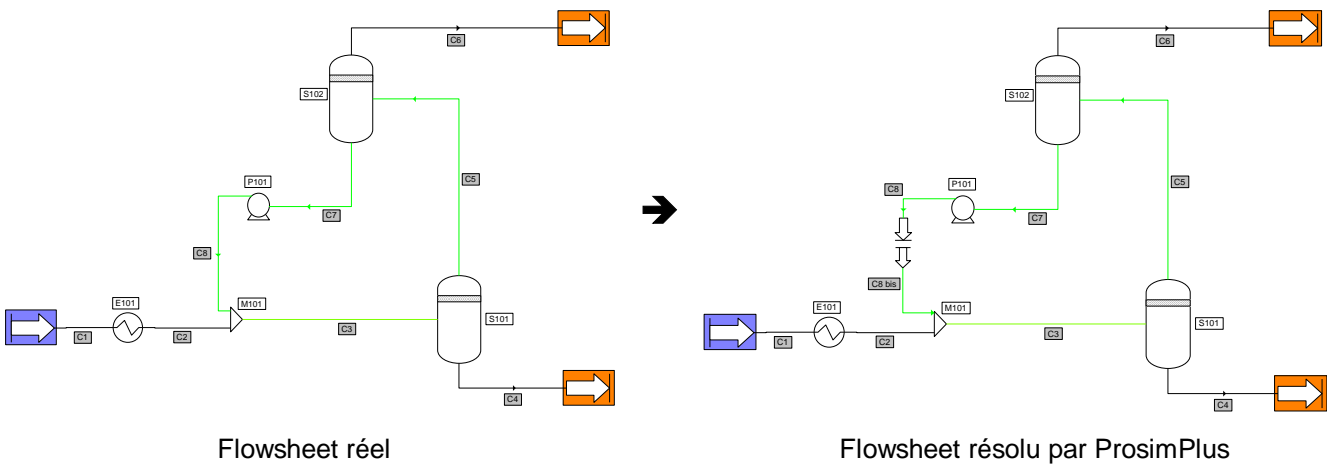
Les exemples présentés ici sont suffisamment simples pour que l'on puisse aisément déterminer les RCMs, les courants coupés et la liste de calcul des modules. Évidemment il n'en est pas de même pour les diagrammes de simulation qui renferment plusieurs dizaines de modules fortement interconnectés. Des algorithmes spécifiques sont utilisés dans ProSimPlus pour accomplir ces différentes tâches.

En résumé et sur le plan numérique, la résolution d'un problème de simulation pure suivant l'approche modulaire simultanée conduit à trois niveaux de calcul :

- le niveau "serveur de propriétés", tel que par exemple la résolution d'une équation d'état ;
- le niveau module : chaque modèle d'unité est résolu séparément au sein d'un module selon une approche numérique adaptée au système d'équations mis en œuvre ;

- le niveau flowsheet où sont résolues les équations associées aux courants de recyclage.

Dans le cas présenté ici, ProSimPlus a choisi de "couper" le courant C8. On peut schématiser l'approche adoptée par le simulateur pour la résolution comme suit :



Il est à noter que l'utilisateur peut modifier les paramètres numériques du gestionnaire de contraintes qui assure la convergence de la simulation. Pour ce faire, l'utilisateur doit utiliser un module de type "gestion des contraintes" (SPEC), ce dernier n'étant connecté à aucun des modules du procédé.



## 2. RESULTATS

### 2.1. Commentaires sur les résultats

La séquence de calcul (l'ordre de calcul des modules) est générée automatiquement. Au niveau du recyclage, aucun courant n'est initialisé et ProSimPlus choisit de faire converger le courant C8.

La convergence du cycle est obtenue en 3 itérations.

### 2.2. Bilans matière et énergie

Dans cet exemple, les bilans matière et énergie sont présentés sous une des nombreuses formes disponibles en sortie de ProSimPlus. L'utilisateur a le choix de faire ou non apparaître tout ou partie des résultats obtenus et de les présenter dans l'unité choisie et sous la forme choisie. Il peut notamment décider de faire apparaître les résultats sous forme de débits massiques ou molaires, de fractions massiques ou molaires et débits totaux. Il peut également configurer à façon les propriétés qui vont apparaître au niveau des résultats. Ceci est valable pour le fichier de résultats HTML, mais également pour le "cartouche" qui apparaît en bas du flowsheet et qui peut être exporté directement vers d'autres applications de bureautique par exemple.

Courants		C1	C2	C3	C4
De		FEED	E101	M101	S102
Vers		E101	M101	S102	Process outlet (heavy)
Débits partiels		kg/h	kg/h	kg/h	kg/h
NITROGEN		252,121698	252,121698	253,025015	47,7441733
METHANE		668,984765	668,984765	678,071323	256,195079
ETHANE		336,779523	336,779523	359,529881	259,174311
PROPANE		273,398523	273,398523	298,029453	260,015346
n-BUTANE		313,866595	313,866595	329,249317	312,514551
n-PENTANE		216,451046	216,451046	221,139957	216,366317
n-HEXANE		698,035843	698,035843	703,582226	698,023934
n-HEPTANE		1332,71321	1332,71321	1337,27118	1332,71103
n-OCTANE		239,88533	239,88533	240,23728	239,885296
Débit total	kg/h	4332,23653	4332,23653	4420,13564	3622,63004
Débit total	m3/h	19,384102	16,5970197	16,6311488	6,48038042
Etat physique		Liq./Vap.	Liq./Vap.	Liq./Vap.	Liquid
Température	°C	40	15	13,5077605	13,4680112
Pression	atm	74,9999797	74,9999797	74,9999797	74,6999798
Enthalpie	kcal/h	-263645,747	-332858,996	-344466,136	-325728,507



Courants		C5	C6	C7	C8
De		S102	S102	S102	P101
Vers		S102	Process outlet (lights)	P101	M101
Débits partiels		kg/h	kg/h	kg/h	kg/h
NITROGEN		205,280842	204,377525	0,90331681	0,90331682
METHANE		421,876244	412,789685	9,08655885	9,08655776
ETHANE		100,35557	77,6051934	22,7503764	22,7503584
PROPANE		38,0141072	13,3831946	24,6309126	24,6309307
n-BUTANE		16,7347661	1,35205986	15,3827062	15,3827216
n-PENTANE		4,77364021	0,08471982	4,68892039	4,68891134
n-HEXANE		5,55829203	0,01189465	5,54639738	5,54638358
n-HEPTANE		4,56015351	0,00216851	4,55798501	4,55797275
n-OCTANE		0,35198412	3,3672E-05	0,35195045	0,35194943
Débit total	kg/h	797,505599	709,606474	87,8991241	87,8991024
Débit total	m3/h	10,21336	21,5629081	0,1613734	0,16094906
Etat physique		Vapor	Vapor	Liquid	Liquid
Température	°C	13,4680112	-60	-60	-55,9900484
Pression	atm	74,6999798	24,9999932	24,9999932	74,9999797
Enthalpie	kcal/h	-18737,6481	-32244,126	-11907,9562	-11607,337

### 3. BIBLIOGRAPHIE

- [1] Koehret B.  
*Conception d'un simulateur de procédés*  
Thèse INPT 1987
- [2] Soave G.  
"Equilibrium constants from a modified Redlich-Kwong equation of state"  
C.E.S., 27, 6,1197-1203 (1972)
- [3] Joulia X.  
Simulation des Procédés chimiques en régime permanent. Formulation et convergence  
Thèse INPT 1987