EXEMPLE D'APPLICATION PROSIMPLUS HNO3

PROCEDE MONO-PRESSION

INTERET DE L'EXEMPLE
Ce document présente une unité de production d'acide nitrique par un procédé mono-pression. Il s'agit d'un procédé assez classique de production industrielle d'acide nitrique. Les principaux modules spécifiques au simulateur ProSimPlus HNO3 sont ici mis en œuvre : colonne d'oxydo-absorption de vapeurs nitreuses, condenseurs de vapeurs nitreuses, réacteurs d'oxydation, échangeurs de chaleur avec volumes d'oxydation, etc. Il s'agit ici d'un exemple de simulation pure, sans spécification sur les courants de sortie. Les points particuliers de cet exemple sont la simulation d'un réacteur de DeNOx sur les gaz de queue et la prise en compte de l'eau de refroidissement du condenseur de vapeurs nitreuses par un courant externe au module.

DIFFUSION	☑ Libre Internet	☐ Réservée clients	☐ Restreinte	☐ Confidentielle

FICHIER PROSIMPLUS CORRESPONDANT	*PSPH_EX_FR-Procede-mono-pression.pmp3*

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. Fives ProSim ne pourra en aucun cas être tenu pour responsable de l'application qui pourra être faite des calculs basés sur cet exemple.

Fives ProSim
Siège social : Immeuble Stratège A - 51 rue Ampère - 31670 Labège - FRANCE
Tél. : +33 (0)5 62 88 24 30
S.A.S. au capital de 147 800 € - 350 476 487 R.C.S. Toulouse - Siret 350 476 487 00037 - APE 5829C - N° TVA FR 10 350 476 487
www.fivesgroup.com / www.fives-prosim.com

TABLE DES MATIERES

1. MODELISATION DU PROCEDE 3

1.1. Présentation du procédé 3

1.2. Schéma du procédé 5

1.3. Constituants 6

1.4. Modèles thermodynamiques 6

1.5. Réactions chimiques 7

1.6. Paramètres opératoires 8

1.6.1. Alimentations du procédé 8

1.6.2. Réacteurs 8

1.6.3. Echangeurs de chaleur 9

1.6.4. Vannes 3 voies 11

1.6.5. Mélangeurs 11

1.6.6. Compresseur, turbine et pompe 12

1.6.7. Colonne d'oxydo-absorption 13

1.6.8. Colonne de blanciement 15

1.7. Initialisations 16

2. RESULTATS 17

2.1. Bilans matière et énergie 17

2.2. Performance du procédé 19

2.3. Profils dans le condenseur de vapeurs nitreuses 20

2.4. Profils dans les colonnes 21

2.4.1. C101 colonne d'oxydo-absorption 21

2.4.2. C102 colonne de blanchiement 23

3. BIBLIOGRAPHIE 24

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

1. MODELISATION DU PROCEDE

1.1. Présentation du procédé

Cet exemple est extrait de [BAD96] et [CLA96] qui décrivent sommairement le procédé. La fabrication d'acide nitrique comprend trois étapes principales :

- ✓ Oxydation de l'ammoniac

$$4\,NH_3 + 5\,O_2 \rightarrow 4\,NO + 6\,H_2O$$

$$4\,NH_3 + 3\,O_2 \rightarrow 2\,N_2 + 6\,H_2O$$

$$2\,NH_3 + 2\,O_2 \rightarrow N_2O + 3\,H_2O$$

- ✓ Oxydation du monoxyde d'azote et condensation de l'eau de combustion

$$2\,NO + O_2 \rightarrow 2\,NO_2 \;\leftrightarrow\; N_2O_4$$

$$H_2O|_{gaz} \leftrightarrow H_2O|_{liquide}$$

- ✓ Fixation du tétraoxyde d'azote

$$\frac{3}{2}\,N_2O_4 + H_2O \;\leftrightarrow 2\,HNO_3 + NO$$

Les représentations mathématiques des équilibres et des cinétiques des réactions ci-dessus sont complexes et des réactions secondaires se produisent, notamment la formation de trioxyde d'azote :

$$NO + NO_2 \;\leftrightarrow\; N_2O_3$$

Le procédé mono-pression (oxydation catalytique et absorption à la même pression) repose sur la réaction :

$$\frac{3}{2}\,N_2O_4 + H_2O \;\leftrightarrow 2\,HNO_3 + NO$$

La caractéristique principale de cette réaction est que, chaque fois que deux molécules d'acide nitrique se forment, il y a également production d'une molécule de monoxyde d'azote NO, qu'il faut alors ré-oxyder en dioxyde d'azote NO_2 puis absorber et ainsi de suite. Ces ré-oxydations successives se font principalement en phase gazeuse, dans des tours d'oxydo-absorption où sont menées parallèlement la réaction de formation de l'acide nitrique et celle de ré-oxydation du NO :

$$2NO + O_2 \rightarrow 2NO_2$$

Dans ce procédé, condensation et absorption se font à la même pression que l'oxydation, entre 5 et 10 bars environ. Il n'y a donc qu'un seul compresseur et la tour d'absorption est équipée dans sa partie inférieure d'un étage de blanchiment.

Le schéma du procédé est fourni au paragraphe 1.2. L'ammoniac liquide est vaporisé par de l'eau de refroidissement (E101), puis filtré après surchauffe (E102) et envoyé dans un mélangeur air-ammoniac (M101). L'air atmosphérique filtré est comprimé (K101), puis réparti en deux courants au niveau de la vanne V103, l'air primaire (Air S06) qui va au mélangeur air-ammoniac (M101) et l'air secondaire qui va à la colonne de blanchiment (C102). Au préalable, une

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

fraction de l'air est prélevée (Air S03) pour l'instrumentation, au niveau de la vanne V102. Le mélange air-ammoniac est dirigé vers le réacteur (R101).

Au niveau de la modélisation du réacteur, trois réactions globales sont prises en compte :

$$4\,NH_3 + 5\,O_2 \rightarrow 4\,NO + 6\,H_2O$$

$$4\,NH_3 + 3\,O_2 \rightarrow 2\,N_2 + 6\,H_2O$$

$$2\,NH_3 + 2\,O_2 \rightarrow N_2O + 3\,H_2O$$

Le gaz après oxydation contient des oxydes d'azote, de l'azote et de l'oxygène. Sa chaleur sensible est récupérée dans une série d'échangeurs (E103, E104, E105, E106). Après condensation (E107), une quantité importante d'acide à faible concentration est formée et envoyée à la tour d'absorption C101. Le gaz mélangé à l'air sortant de la colonne de blanchiment C102 au niveau du mélangeur M103 est dirigé sur les plateaux perforés de la colonne d'absorption (C101) équipée en particulier de serpentins de réfrigération. De l'eau de procédé est introduite en tête et l'acide à la concentration désirée est soutiré à sa base. Cet acide va ensuite à la colonne de blanchiment (C102). Il se produit un stripage par de l'air secondaire (Air S08). Les gaz sortants en tête de l'absorbeur C101 sont envoyés dans une série d'échangeurs gaz-gaz (E108, E109, E105), puis mélangés à une faible quantité d'ammoniac afin de réagir dans un réacteur catalytique permettant de réduire la teneur en NOx des gaz de queue. Il se produit au niveau de ce réacteur (R102) opérant autour de 270°C un ensemble de réactions qui peuvent être modélisées par les deux réactions suivantes :

$$4\,NH_3 + 6\,NO \rightarrow 5\,N_2 + 6\,H_2O$$

$$8\,NH_3 + 6\,NO_2 \rightarrow 7\,N_2 + 12\,H_2O$$

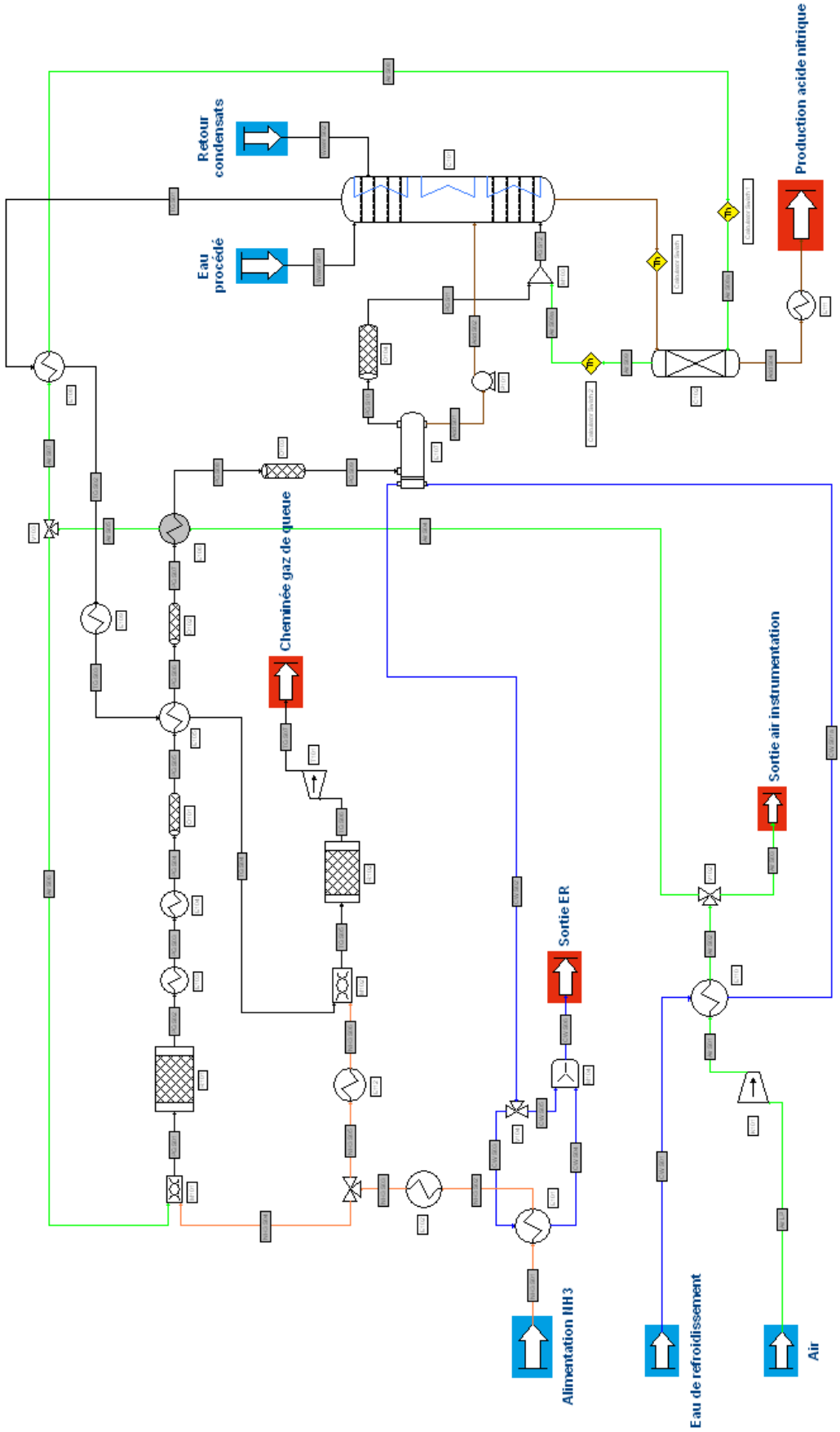
Les gaz de queue appauvris en NOx sont ensuite envoyés dans une turbine de détente (T101) et enfin à la cheminée.

En parallèle, de la vapeur est produite par intégration énergétique (non modélisée dans cet exemple). En outre, de l'eau de refroidissement passe successivement dans le condenseur E107 puis dans l'échangeur E101.

L'objectif de ce procédé est de produire 1 000 t/j d'acide nitrique (équivalent 100%) à une concentration de 58% massique.

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

1.2. Schéma du procédé



Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

1.3. Constituants

Les constituants pris en compte dans la simulation, leurs formules chimiques et numéros CAS® [1] sont présentés dans le tableau ci-après. Leurs propriétés de corps pur sont extraites de la base de données spécifique « HNO3 » livrée avec ProSimPlus HNO3.

Constituant	Formule chimique	Numéro CAS
Ammoniac	NH_3	7664-41-7
Oxygène	O_2	7782-44-7
Azote	N_2	7727-37-9
Oxyde d'azote	NO	10102-43-9
Dioxyde d'azote	NO_2	10102-44-0
Tétraoxyde d'azote	N_2O_4	10544-72-6
Oxyde nitreux	N_2O	10024-97-2
Acide nitrique	HNO_3	7697-37-2
Eau	H_2O	7732-18-5

1.4. Modèles thermodynamiques

Pour l'essentiel du procédé, le modèle thermodynamique sélectionné est le modèle « Spécifique HNO3 ». Ce modèle prend en compte la non-idéalité de la phase liquide par des corrélations basées sur des données expérimentales de pressions partielles de l'eau et de l'acide nitrique au-dessus de solutions aqueuses d'acide nitrique. La phase gaz est supposée gaz parfait. L'utilisation d'une corrélation basée sur des données expérimentales permet de prendre en compte l'enthalpie d'excès du binaire eau – acide nitrique.

Le modèle thermodynamique « Engels (acides forts) » est utlisé pour la colonne de blanchiment afin de mieux représenter la solubilité des NOx ainsi que la complexité de l'équilibre H_2O – HNO_3 dans cet équipement. La base enthalpique « H*=DH0f, gaz parfait, 25°C, 1 atm » est sélectionnée à la place de la base enthalpique par défaut de ce modèle afin d'assurer la cohérence avec le modèle thermodynamique « Spécifique HNO3 ». Ce modèle est également appliqué au refroidisseur d'acide produit E111.

Pour le circuit d'eau de refroidissement, le « modèle thermodynamique spécifique à l'eau » est utilisé [HAA84]. Pour pouvoir sélectionner ce modèle, seul le constituant eau doit être présent dans la liste des constituants du calculator. Ce modèle est utlisé dans l'alimentation en eau de refroidissement, la vanne trois-voie V104 et le mélangeur M104.

[1] *Les CAS RN® sont la propriété intellectuelle de American Chemical Society et sont utilisés par Fives ProSim SAS avec l'autorisation expresse d'ACS. Les CAS RN® n'ont pas été vérifiés par ACS et peuvent être inexacts.*

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

1.5. Réactions chimiques

Les réactions d'oxydation du NO, de dimérisation du NO_2 et d'oxydo-absorption de l'acide nitrique sont pré-codées et n'ont donc pas besoin d'être décrites par l'utilisateur pour les modules spécifiques de ProSimPlus HNO3. Les seules réactions à décrire sont les suivantes. Elles sont à décrire dans le calculator utilisant le modèle « Spécifique HNO3 ».

- ✓ Oxydation de l'ammoniac

$$4\,NH_3 + 5\,O_2 \rightarrow 4\,NO + 6\,H_2O$$

$$4\,NH_3 + 3\,O_2 \rightarrow 2\,N_2 + 6\,H_2O$$

$$2\,NH_3 + 2\,O_2 \rightarrow N_2O + 3\,H_2O$$

- ✓ Réduction des NOx

$$4\,NH_3 + 6\,NO \rightarrow 5\,N_2 + 6\,H_2O$$

$$8\,NH_3 + 6\,NO_2 \rightarrow 7\,N_2 + 12\,H_2O$$

Ces différentes réactions sont définies comme :

- ✓ Type de réaction : Contrôlée
- ✓ Modèle cinétique : Instantané
- ✓ Chaleur de réaction : Calculées à partir des enthalpies standards de formation à 25°C

Le modèle cinétique instantané est choisi car des taux de conversion sont définis pour chacune de ces réactions au niveau des réacteurs R101 et R102 (§ 1.6.2).

Deux jeux de réactions sont à créer :

- ✓ Un avec seulement les réactions d'oxydation de l'ammoniac,
- ✓ Un avec seulement les réactions de réduction des NOx.

L'équilibre de dimérisation du NO_2 en phase gaz est décrit pour être pris en compte dans la colonne de blanchiment. En effet, cette colonne est modélisée par un module non spécifique de ProSimPlus HNO3 (§ 1.6.8). Elle est à décrire dans le calculator utilisant le modèle « Engels (acides forts) ».

$$2\,NO_2 \leftrightarrow N_2O_4$$

La constante d'équilibre retenue est celle proposée par Koukolik [KOU68] :

$$Ln(K_3) = -21{,}24366 + \frac{6891{,}64}{T}$$

⚠	Les ordres partiels à spécifier sont : 2 pour le NO_2 et 1 pour le N_2O_4.

La chaleur de réaction de cette réaction est calculée à partir des enthalpies standards de formation à 25°C.

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

1.6. Paramètres opératoires

1.6.1. Alimentations du procédé

	Ammoniac	Eau procédé	Retour condensats	Eau de refroidissement
Débit massique partiel (kg/h)				
Ammoniac	11 874	0	0	0
Eau	24	3 555	12 520	2 000 000
Température (°C)	10	25	25	22
Pression (bar)	14	6.5	6.6	4.2

	Air
Fraction molaire (-)	
Oxygène	0.29
Azote	0.71
Débit total (Nm^3/h)	165 178
Humidité relative (%)	46
Température (°C)	25
Pression (bar)	1

1.6.2. Réacteurs

✓ R101 four d'oxydation de l'ammoniac

Paramètres opératoires	Valeur
Type de réacteur	Simple
Jeu de réaction	Oxydation de l'ammoniac
Taux de conversion de l'ammoniac (%)	
$4\,NH_3 + 5\,O_2 \rightarrow 4\,NO + 6\,H_2O$	96.2% du NH_3
$4\,NH_3 + 3\,O_2 \rightarrow 2\,N_2 + 6\,H_2O$	3.7% du NH_3
$2\,NH_3 + 2\,O_2 \rightarrow N_2O + 3\,H_2O$	0.1% du NH_3
Fonctionnement thermique	Adiabatique
Pertes de charge (bar)	0.05

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

✓ R102 réacteur catalytique de réduction des NOx

Paramètres opératoires	Valeur
Type de réacteur	Simple
Jeu de réaction	Réduction des NOx
Taux de conversion	
$4\ NH_3 + 6\ NO \rightarrow 5\ N_2 + 6\ H_2O$	90.0% du NO
$8\ NH_3 + 6\ NO_2 \rightarrow 7\ N_2 + 12\ H_2O$	28.5% du NO_2
Fonctionnement thermique	Adiabatique
Pertes de charge (bar)	0.1

✓ Réacteurs d'oxydation

Ces modules permettent de modéliser l'oxydation du NO et la dimérisation du NO_2 ayant lieu dans les volumes gazeux des canalisations.

	O101	O102	O103	O104
Paramètres opératoires	**Valeur**			
Type de réacteur	Réacteur piston simplifié			
Volume d'oxydation (m^3)	9	28	6	2
Calcul de la quantité de chaleur échangée	Adiabatique			
Efficacité d'oxydation	1			
Réactions				
Vitesse de la réaction d'oxydation	Koukolik			
Constante d'équilibre de dimérisation	Koukolik			
Pertes de charge (bar)	0.01			

1.6.3. Echangeurs de chaleur

✓ Echangeurs de chaleur généralisés

	E101	E105	E108	E110
Paramètres opératoires	**Valeur**			
Courant chaud				
Température de sortie (°C)	-	250	100	102
Perte de charge (bar)	0.05			
Courant froid				
Température de sortie (°C)	34	-		
Perte de charge (bar)	4.80	0.05	0.02	0.05

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

✓ Echangeur de chaleur généralisé HNO3

	E106
Paramètre opératoire	**Valeur**
Courant chaud	
Température de sortie (°C)	175
Perte de charge (bar)	0.05
Volume d'oxydation (m^3)	7.4873
Courant froid	
Température de sortie (°C)	-
Perte de charge (bar)	0.05
Volume d'oxydation (m^3)	0

Les paramètres suivants sont adoptés pour la prise en compte des réactions chimiques dans cet échangeur :

- Modèle hydrodynamique : Piston
- Efficacité d'oxydation : 1
- Calcul de la constante de vitesse de la réaction d'oxydation : Koukolik
- Calcul de la constante de l'équilibre de dimérisation : Koukolik
- Prise en compte d'une température maximale d'oxydation : Activée

✓ Consignateurs de température

	E102	E103	E104	E109	E111	E112
Paramètres opératoires	**Valeur**					
Température de sortie (°C)	120	450	350	100	45	180
Pertes de charge (bar)	1.50	0.05		0.01	0.05	1.15
Volume d'oxydation (m^3)	0		1.9514	0		

Pour l'échangeur de chaleur dans lequel les réactions chimiques sont prises en compte (E104, volume d'oxydation non nul), les paramètres suivants sont adoptés :

- Modèle hydrodynamique : Piston
- Efficacité d'oxydation : 1
- Calcul de la constante de vitesse de la réaction d'oxydation : Koukolik
- Calcul de la constante de l'équilibre de dimérisation : Koukolik
- Prise en compte d'une température maximale d'oxydation : Activée

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

✓ E107 condenseur de vapeurs nitreuses

Paramètres opératoires	Valeur
Longueur des tubes (m)	9
Nombre de tubes	2 100
Circulation des vapeurs	Intérieur des tubes
Diamètre intérieur des tubes (mm)	25.4
Diamètre équivalent (mm)	25.47
Eau de refroidissement	
Sens de circulation	Contre-courant
Coefficients de transfert de chaleur (kcal/h/m^2/K)	
Oxydo-absorption	290
Oxydation	215
Pertes de charge (bar)	0.07
Réactions	
Calcul de la constante de vitesse de la réaction d'oxydation	Koukolik
Calcul de la constante de l'équilibre de dimérisation	Koukolik
Calcul de la constante d'absorption de N_2O_4 dans l'eau	Miller (calottes)
Nombre de points intermédiaires pour l'impression	21

1.6.4. Vannes 3 voies

	Paramètres opératoires	Valeur
V101	Débit massique du courant « NH3 S05 »	87.4 kg/h
V102	Débit massique du courant « Air S03 »	1 006.8 kg/h
V103	Taux de partage du courant « Air S06 »	79.93111 %
V104	Taux de partage du courant « CW S03 »	80 %

1.6.5. Mélangeurs

	M101	M102	M103	M104
Paramètres opératoires	**Valeur**			
Type	Mélangeur statique		Autre mélangeur	Mélangeur
Pression de sortie (bar)	7.60	6.35	Egale à la plus faible des alimentations	

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

1.6.6. Compresseur, turbine et pompe

✓ K101 compresseur d'air

Paramètres opératoires	Valeur
Type	Compresseur
Pression de refoulement (bar)	7.8
Efficacité isentropique (-)	0.845
Efficacité mécanique (-)	1
Efficacité électrique (-)	1
Réactions chimiques	Non prises en compte

✓ T101 turbine de détente des gaz de queue

Paramètres opératoires	Valeur
Type	Turbine
Pression de décharge (bar)	1.03
Efficacité isentropique (-)	0.83
Efficacité mécanique (-)	1
Efficacité électrique (-)	1

💡	Il est possible de simuler un turbo-expandeur en transmettant la puissance disponible à la turbine au compresseur via un courant d'information. Ceci est détaillé dans l'exemple « PSPH_EX_FR - Procede bipression ».

✓ P101 pompe centrifuge

Paramètres opératoires	Valeur
Type	Pompe centrifuge
Pression de refoulement (bar)	7.5
Efficacité volumétrique (-)	0.65
Efficacité mécanique (-)	1
Efficacité électrique (-)	1

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

1.6.7. Colonne d'oxydo-absorption

✓ C101 colonne d'oxydo-absorption

Paramètres opératoires	Valeur
Type	Colonne d'oxydo-absorption à plateaux
Nombre de plateaux	35
Diamètre de la colonne (m)	6.1
Diamètre des perforations (mm)	2
Section libre (%)	2.60
Profil de température dans la colonne	Calculé à partir des températures
Alimentations intermédiaires	
Retour condensats	Plateau 2
Acide faible issu du condenseur de vapeurs nitreuses	Plateau 32
NOx en phase liquide	
NO oxydé (%)	0
Solubilité de NOx en phase liquide	Prise en compte
Constante de Henry	Calculée à partir du modèle interne
Pertes de charge totales (bar)	0.77
Corrélations	
Calcul de la constante de vitesse de la réaction d'oxydation	Koukolik
Calcul de la constante de l'équilibre de dimérisation	Koukolik
Calcul de l'équilibre du système NOx – eau – acide nitrique	Zhidkov
Impression des profils	Complet

⚠	Les étages des colonnes sont numérotés de haut en bas (plateau 1 : plateau de tête ; plateau 35 : plateau de pied).

Le tableau page suivante présente les paramètres des plateaux.

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

Etage	Efficacité d'oxydation	Volume d'oxydation (m^3)	Modèle hydrodynamique	Efficacité d'absorption	Hauteur entre deux plateaux (m)	Température (°C)
1	1	65,8	Réacteur piston	Atroschenko 2	2,25	29,4
2	1	65,8	Réacteur piston	Atroschenko 2	2,25	29,6
3	1	65,8	Réacteur piston	Atroschenko 2	2,25	30,0
4	1	58,4	Réacteur piston	Atroschenko 2	2,25	30,6
5	1	58,4	Réacteur piston	Atroschenko 2	2,00	31,4
6	1	58,4	Réacteur piston	Atroschenko 2	2,00	-
7	1	58,4	Réacteur piston	Atroschenko 2	2,00	-
8	1	58,4	Réacteur piston	Atroschenko 2	2,00	-
9	1	51,1	Réacteur piston	Atroschenko 2	2,00	-
10	1	51,1	Réacteur piston	Atroschenko 2	1,75	-
11	1	51,1	Réacteur piston	Atroschenko 2	1,75	-
12	1	51,1	Réacteur piston	Atroschenko 2	1,75	-
13	1	51,1	Réacteur piston	Atroschenko 2	1,75	-
14	1	35,4	Réacteur piston	Atroschenko 2	1,75	-
15	1	35,4	Réacteur piston	Atroschenko 2	1,21	-
16	1	35,4	Réacteur piston	Atroschenko 2	1,21	-
17	1	35,4	Réacteur piston	Atroschenko 2	1,21	-
18	1	35,4	Réacteur piston	Atroschenko 2	1,21	-
19	1	35,4	Réacteur piston	Atroschenko 2	1,21	-
20	1	35,4	Réacteur piston	Atroschenko 2	1,21	-
21	1	35,4	Réacteur piston	Atroschenko 2	1,21	-
22	1	35,4	Réacteur piston	Atroschenko 2	1,21	-
23	1	35,4	Réacteur piston	Atroschenko 2	1,21	-
24	1	35,4	Réacteur piston	Atroschenko 2	1,21	-
25	1	35,4	Réacteur piston	Atroschenko 2	1,21	-
26	1	35,4	Réacteur piston	Atroschenko 2	1,21	-
27	1	35,4	Réacteur piston	Atroschenko 2	1,21	-
28	1	35,4	Réacteur piston	Atroschenko 2	1,21	-
29	1	35,4	Réacteur piston	Atroschenko 2	1,21	-
30	1	35,4	Réacteur piston	Atroschenko 2	1,21	-
31	1	35,4	Réacteur piston	Atroschenko 2	1,21	-
32	1	78,9	Réacteur piston	Atroschenko 2	1,21	52,0
33	1	58,4	Réacteur piston	Atroschenko 2	2,70	52,9
34	1	58,4	Réacteur piston	Atroschenko 2	2,00	54,5
35	1	58,4	Réacteur piston	Atroschenko 2	2,00	57,0

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

1.6.8. Colonne de blanciement

✓ Calculator switch

Ces modules permettent d'effectuer le changement de modèle thermodynamique entre les opérations unitaires utilisant le modèle « Spécifique HNO3 » et celles utilisant le modèle « Engels (acides forts) ». Le calcul des enthalpies liquides n'étant pas identiques entre ces deux modèles, l'utilisation d'un module « Calculator switch » est nécessaire pour ne pas fausser le bilan enthalpique sur la colonne de blanchiment. Le modèle « Engels (acides forts) » est utilisé dans la colonne de blanchiment C102 et dans le refroidisseur d'acide produit E111. Le modèle « Spécifique HNO3 » est utilisé dans le reste du procédé.

Opération unitaire	Modèle thermodynamique	Etat physique en sortie
Calculator Switch	Engels (strong acids)	Calculé
Calculator Switch 1		
Calculator Switch 2	Spécifique HNO3	

✓ C102 colonne de blanchiment

Paramètres opératoires	Valeur
Type de colonne	Absorbeur
Modèle thermodynamique	Engels
Nombre d'étages théoriques	8
Pertes de charge (bar)	0.41
Efficacité de plateau	1 pour chaque plateau
Colonne réactive	Equilibre NO_2/N_2O_4 en phase vapeur
Impression des profils	Complet

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

1.7. Initialisations

La séquence de calcul est déterminée automatiquement par ProSimPlus HNO3. Deux courants coupés sont déterminés : « Air S09 » (sortie gaz de tête de la colonne de blanchiment) et « PG S07 » (courant entre les modules « O102 » et « E106 »). Les initialisations ci-dessous de ces courants sont utilisées pour la simulation.

Courant	Air S09	PG S07
Fraction massique (-)		
Oxygène	0.22	0.03
Azote	0.74	0.71
Oxyde d'azote	0	0.04
Dioxyde d'azote	0	0.10
Acide nitrique	0.03	0
Eau	0.01	0.12
Débit massique (kg/h)	44 000	180 000
Température (°C)	Point de rosée	300
Pression (bar)	7.24	7.38

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

2. RESULTATS

2.1. Bilans matière et énergie

Ce document ne présente que les informations principales sur les courants les plus pertinents. ProSimPlus HNO3 fournit cependant des résultats complets sur l'ensemble des courants et des opérations unitaires du procédé.

Courants		Acid produc...	Acid S02	Acid S03	Air LP	Air S04	Air S06	Air S08
De		E111	P101	C101	Alimentaiton...	V102	V103	E108
Débit total (massique)	t/d	1725.6	792.28	1731.5	5074.8	5050.6	4037	1013.6
Débit total (molaire)	Nm3/h	52321	27132	52212	1.6518E005	1.6439E005	1.314E005	32992
Fractions massiques								
AMMONIA		0	0	0	0	0	0	0
OXYGEN		0.00019363	0	0	0.23078	0.23078	0.23078	0.23078
NITROGEN		0.00010932	0	0	0.76006	0.76006	0.76006	0.76006
NITRIC OXIDE		0	0	0	0	0	0	0
NITROGEN DIOXIDE		3.2354E-010	0	0.00010018	0	0	0	0
NITROGEN TETROXIDE		0	0	0.0041807	0	0	0	0
NITROUS OXIDE		0	0	0	0	0	0	0
NITRIC ACID		0.58112	0.47529	0.58102	0	0	0	0
WATER		0.41857	0.52471	0.4147	0.0091548	0.0091548	0.0091548	0.0091548
Fractions molaires								
AMMONIA		0	0	0	0	0	0	0
OXYGEN		0.00018638	0	0	0.20694	0.20694	0.20694	0.20694
NITROGEN		0.0001202	0	0	0.77848	0.77848	0.77848	0.77848
NITRIC OXIDE		0	0	0	0	0	0	0
NITROGEN DIOXIDE		2.1661E-010	0	6.7444E-005	0	0	0	0
NITROGEN TETROXIDE		0	0	0.0014073	0	0	0	0
NITROUS OXIDE		0	0	0	0	0	0	0
NITRIC ACID		0.28406	0.2057	0.28558	0	0	0	0
WATER		0.71564	0.7943	0.71295	0.014581	0.014581	0.014581	0.014581
Etat physique		Liquide	Liquide	Liquide	Vapeur	Vapeur	Vapeur	Vapeur
Température	°C	45	49.436	57	25	102	236.18	100
Pression	bar	7.6	7.5	7.24	1	7.75	7.7	7.65
Flux enthalpique	kW	-1.6669E005	-89450	-1.6632E005	-7217.6	-2584.8	4421	-542.8
Fraction vaporisée molaire		0	0	0	1	1	1	1

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

Courants		CW S01	CW S02	CW S06	NH3 S01	NH3 S04	PG S02	PG S09
De		Eau de refr...	E107	M104	Alimentation...	V101	R101	O103
Débit total (massique)	t/d	48000	48000	48000	285.55	283.45	4320.4	4320.4
Débit total (molaire)	Nm3/h	2.4883E006	2.4883E006	2.4883E006	15657	15542	1.5082E005	1.4557E005
Fractions massiques								
AMMONIA		0	0	0	0.99798	0.99798	0	0
OXYGEN		0	0	0	0	0	0.064173	0.02267
NITROGEN		0	0	0	0	0	0.71219	0.71219
NITRIC OXIDE		0	0	0	0	0	0.11098	0.03314
NITROGEN DIOXIDE		0	0	0	0	0	0	0.11907
NITROGEN TETROXIDE		0	0	0	0	0	0	0.00027466
NITROUS OXIDE		0	0	0	0	0	8.4605E-005	8.4605E-005
NITRIC ACID		0	0	0	0	0	0	0
WATER		1	1	1	0.0020171	0.0020171	0.11258	0.11258
Fractions molaires								
AMMONIA		0	0	0	0.99809	0.99809	0	0
OXYGEN		0	0	0	0	0	0.053654	0.019637
NITROGEN		0	0	0	0	0	0.68016	0.70467
NITRIC OXIDE		0	0	0	0	0	0.098948	0.030613
NITROGEN DIOXIDE		0	0	0	0	0	0	0.071735
NITROGEN TETROXIDE		0	0	0	0	0	0	8.274E-005
NITROUS OXIDE		0	0	0	0	0	5.1428E-005	5.3282E-005
NITRIC ACID		0	0	0	0	0	0	0
WATER		1	1	1	0.0019071	0.0019071	0.16719	0.17321
Etat physique		Liquide	Liquide	Liquide	Liquide	Vapeur	Vapeur	Vapeur
Température	°C	22	38.857	37.071	10	120	929.25	182.21
Pression	bar	4.2	4.15	4.1	14	7.7	7.55	7.32
Flux enthalpique	kW	-1.3638E006	-1.3246E006	-1.3288E006	-13071	-8235.2	-3814.2	-57528
Fraction vaporisée molaire		0	0	0	0	1	1	1

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

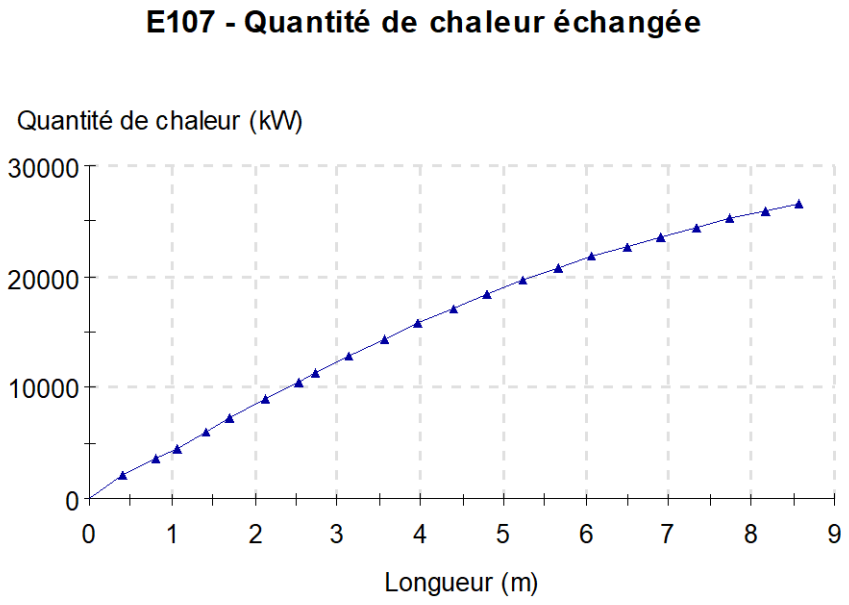
Courants		PG S12	TG S05			
De		M103	M102		.	
Débit total (massique)	t/d	4547.7	3996.4			
Débit total (molaire)	Nm3/h	1.463E005	1.3302E005			
Fractions massiques						
AMMONIA		0	0.00052382			
OXYGEN		0.060346	0.032221			
NITROGEN		0.84595	0.96267			
NITRIC OXIDE		0.027653	0.00041465			
NITROGEN DIOXIDE		0.046412	0.00011735			
NITROGEN TETROXIDE		0.014013	1.9983E-011			
NITROUS OXIDE		8.0377E-005	9.1466E-005			
NITRIC ACID		0.00072183	3.8672E-007			
WATER		0.0048189				
Fractions molaires						
AMMONIA		0				
OXYGEN		0.054747				
NITROGEN		0.87664				
NITRIC OXIDE		0.026753				
NITROGEN DIOXIDE		0.029286				
NITROGEN TETROXIDE		0.0044212				
NITROUS OXIDE		5.3014E-005				
NITRIC ACID		0.00033254				
WATER		0.0077652				
Etat physique		Vapeur	.	.	.	.
Température	°C	56.324				
Pression	bar	7.24				
Flux enthalpique	kW	4421.4				
Fraction vaporisée molaire		1				

2.2. Performance du procédé

Ce procédé permet de produire 1 003 t/j d'acide nitrique (équivalent 100%) à une teneur massique de 58,1% massique. La teneur en NOx en sortie de la colonne d'oxydo-absorption est de 460 ppmv équivalent NO. Celle en sortie du réacteur de réduction des NOx est de 90 ppmv équivalent NO.

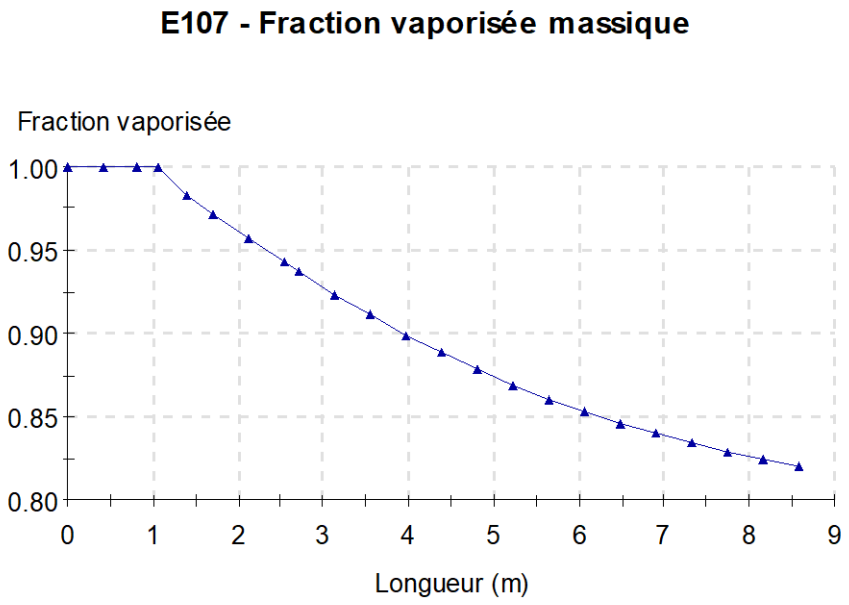
Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

2.3. Profils dans le condenseur de vapeurs nitreuses



Quantité de chaleur échangée

La courbe suivante montre qu'environ 12% de la longueur de l'échangeur ne sont utilisés que pour le refroidissement du gaz entrant jusqu'à son point de rosée. Seules les réactions en phase vapeur sont prises en compte. A partir du début de la condensation l'absorption réactive démarre.



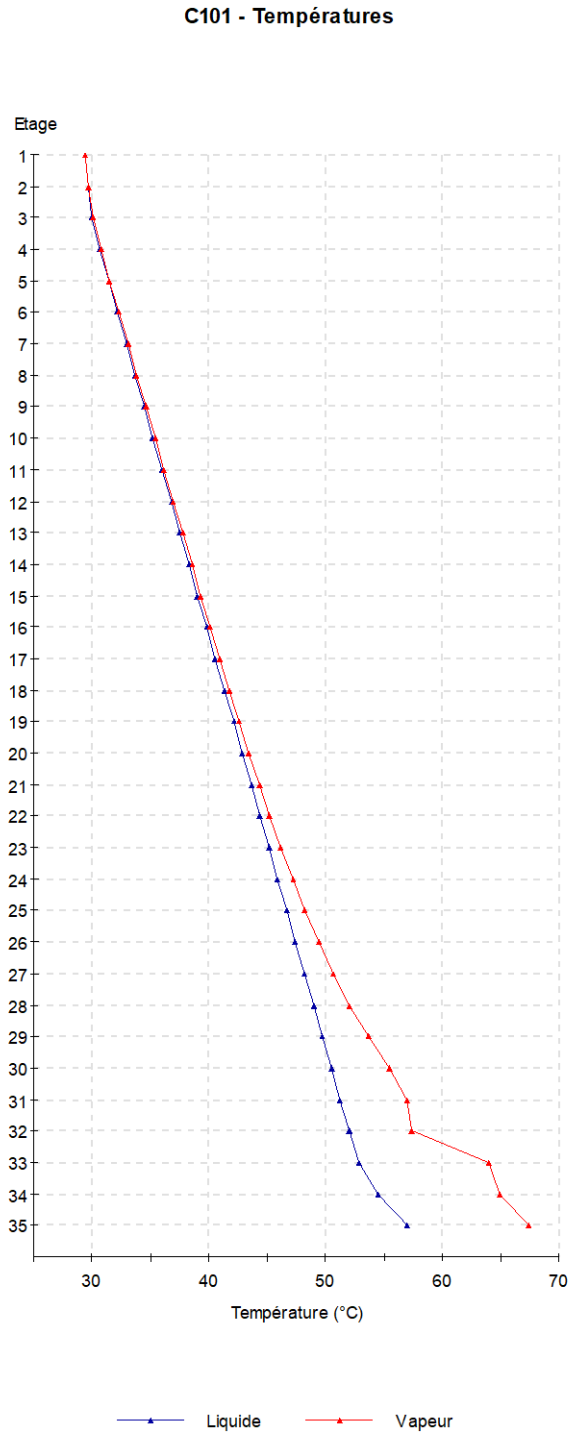
Profil de fraction vaporisée massique le long du condenseur

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

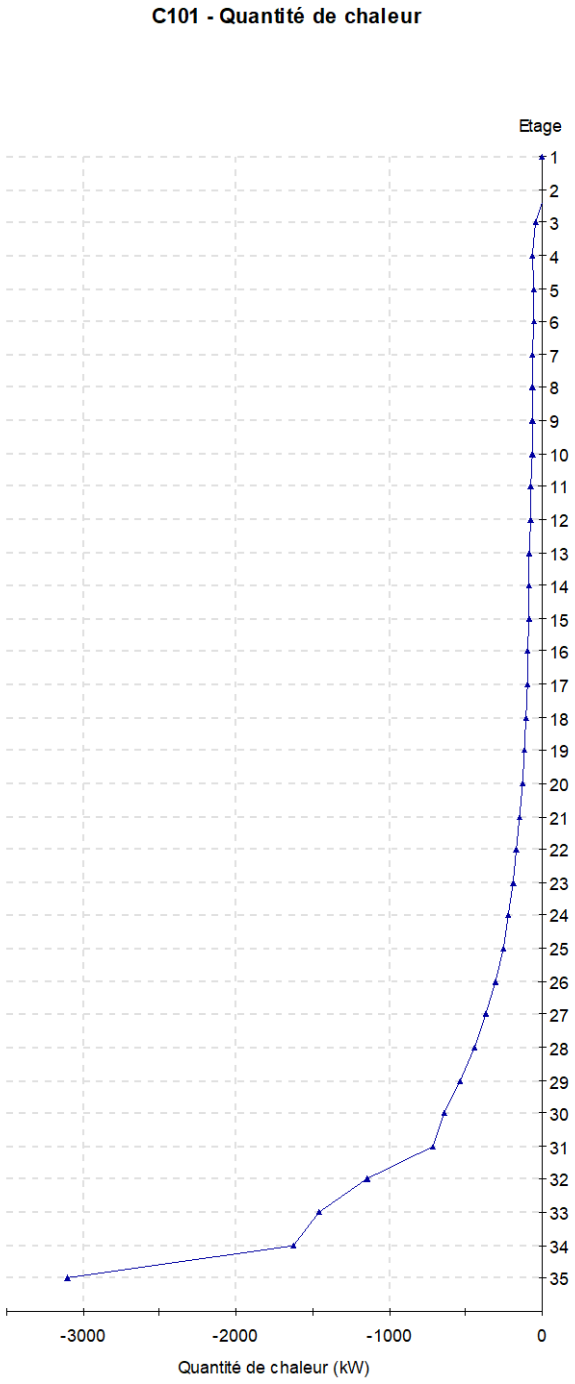
2.4. Profils dans les colonnes

2.4.1. C101 colonne d'oxydo-absorption

Les étages des colonnes sont numérotés de haut en bas (plateau 1 : plateau de tête ; plateau 35 : plateau de pied).

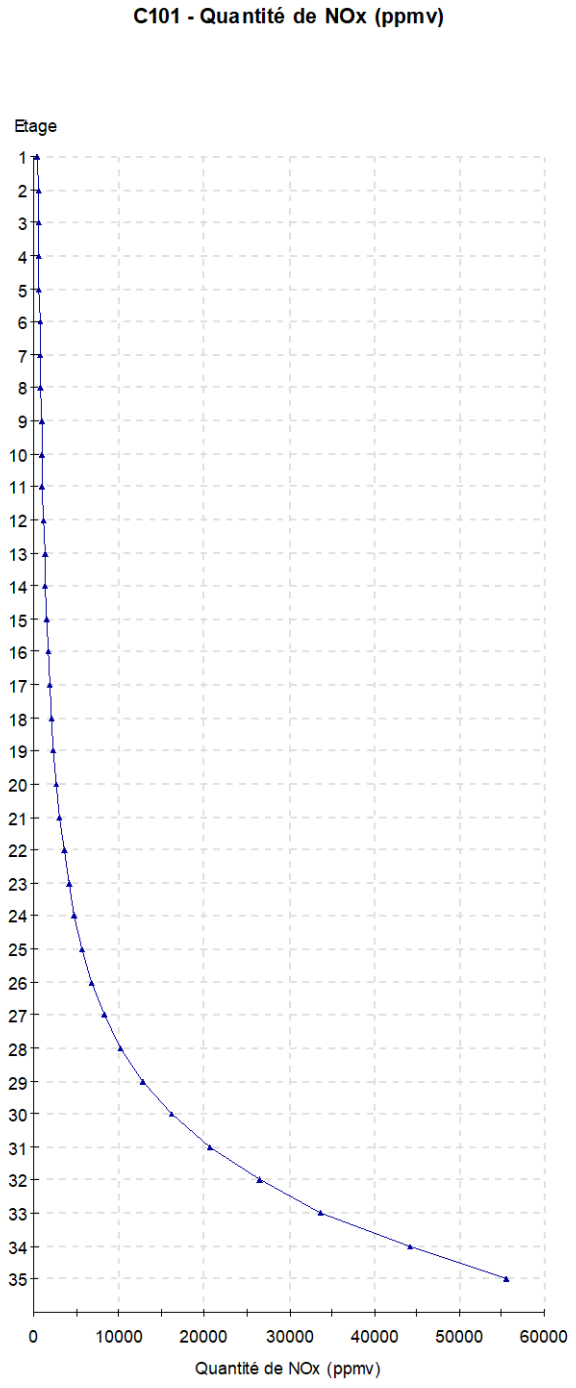


Profil(s) de température dans la colonne

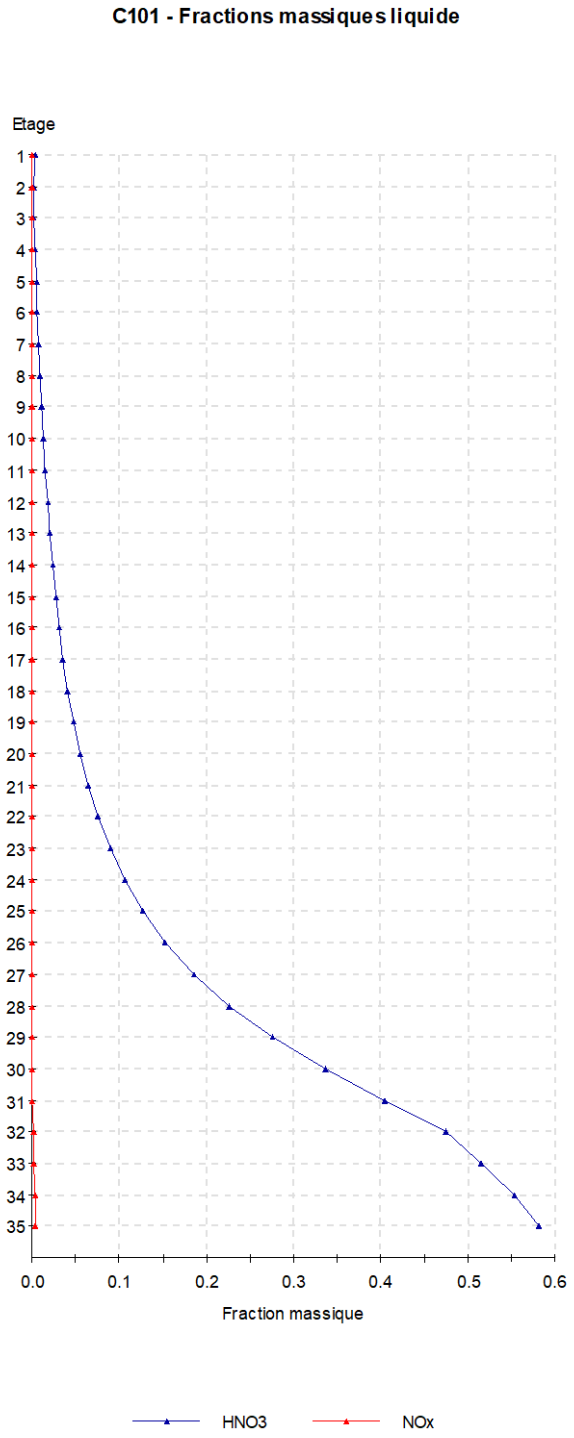


Profil de quantité de chaleur échangée dans la colonne

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés



Profil de quantité de NOx (ppmv) dans la colonne

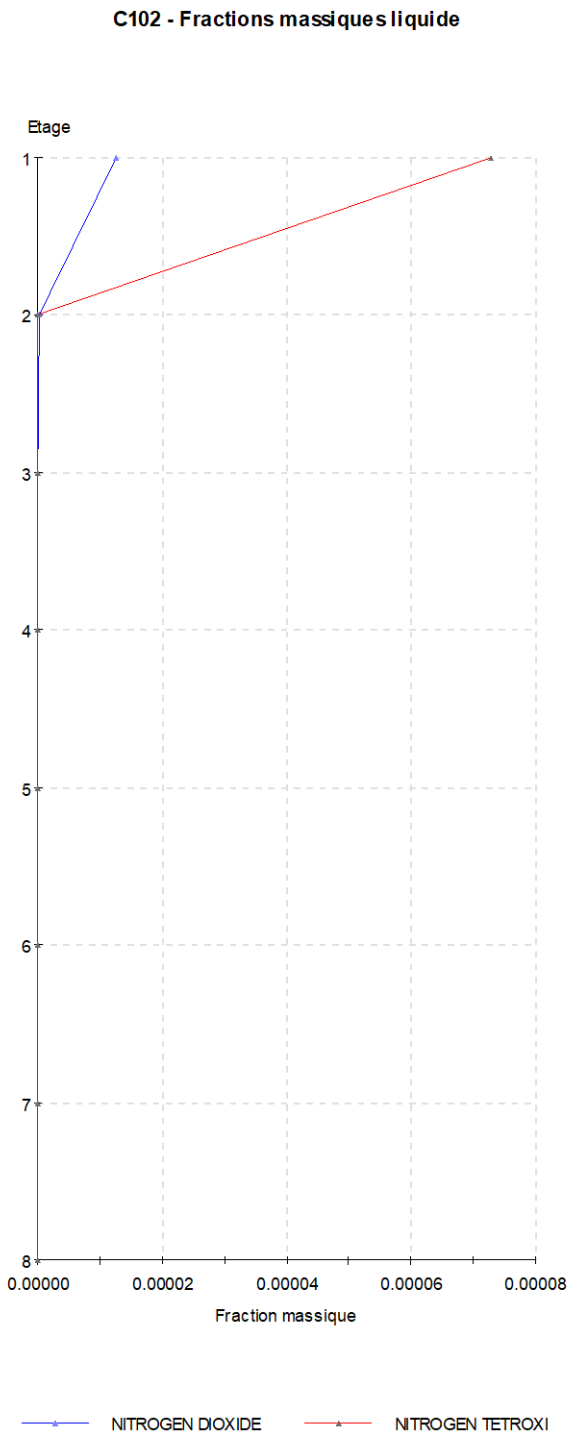


Profils des fractions massiques liquide dans la colonne

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

2.4.2. C102 colonne de blanchiement

Les étages des colonnes sont numérotés de haut en bas (plateau 1 : plateau de tête ; plateau 8 : plateau de pied).



Profil des fractions massiques liquide dans la colonne

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

3. BIBLIOGRAPHIE

[BAD96] BADOUAL C., “Acide nitrique”, Techniques de l'Ingénieur, J6085 (1996)

[CLA96] CLARKE S.I., MAZZAFRA W.J., “Nitric Acid”, Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology, 4th edition, 17, 80-107 (1996)

[HAA84] HAAR L., GALLAGHER J.S., KELL J. H., “NBS/NRC Steam Tables”, Hemisphere Publishing Corporation (1984)

[JOU81] JOULIA X., “Contribution au développement d'un programme général de simulation. Application à l'analyse du fonctionnement d'un atelier de production d'acide nitrique”, Thèse INPT (1981)

[KOU68] KOUKOLIK M., MAREK J., “Mathematical Model of HNO3 Oxidation-Absorption Equipment”, Proc. Fourth European Symp. on Chem. Reaction Eng. (suppl. Chem. Eng. Sci.), 347-359 (1968)

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés