

# Démarrer avec ProSim DAC®

## Cas 1 : Principales caractéristiques

Software & Services In Process Simulation

*We guide You to efficiency*



ProSim

# Introduction

- Ce document présente les caractéristiques générales de ProSim DAC, la solution ProSim pour la simulation dynamique de colonne d'adsorption gaz.
- Ce guide pas-à-pas décrit les différentes fonctionnalités nécessaires pour construire une simulation d'une colonne d'adsorption gaz-solide. Il est basé sur un cycle TSA pour éliminer un COV (dichlorométhane) d'un flux d'azote. L'adsorbant est un charbon actif.

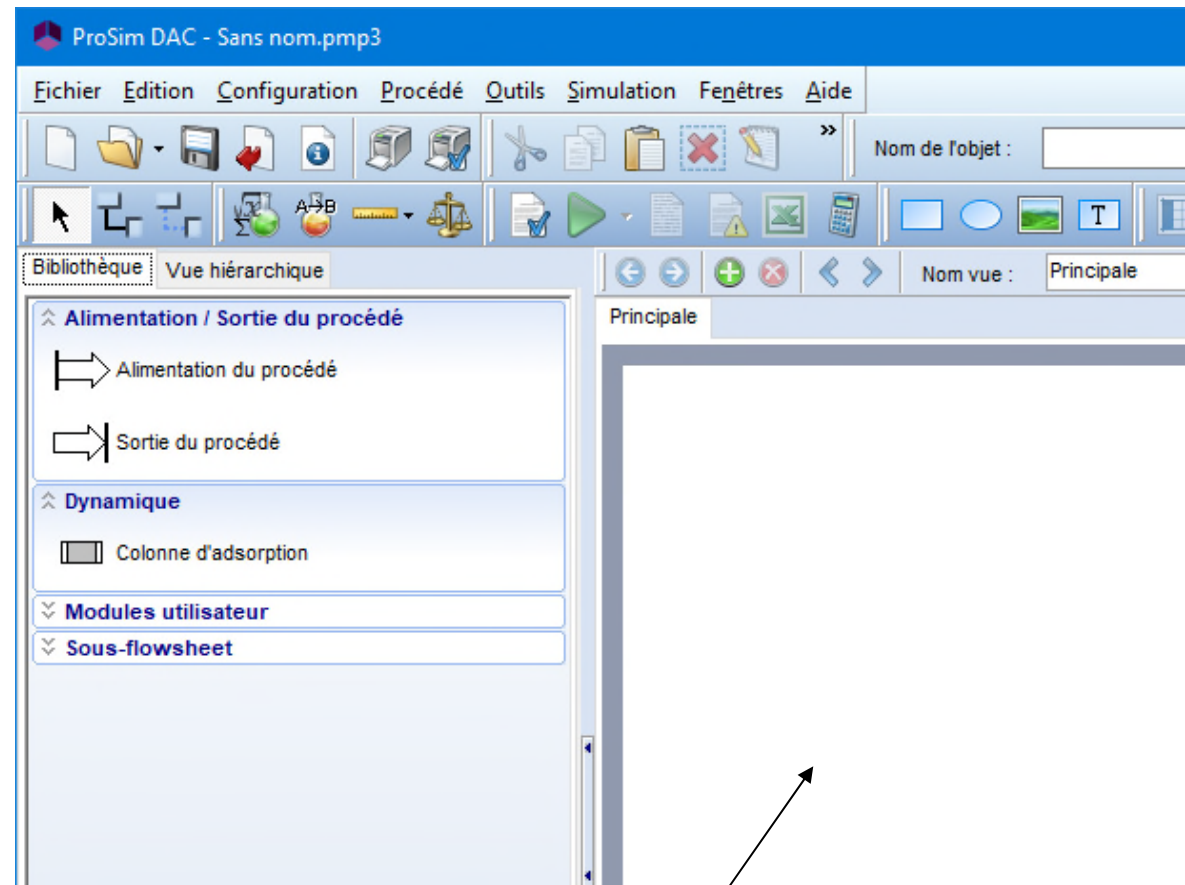
# Prérequis : Présentation de l'interface

Barre des menus

Barre d'outils

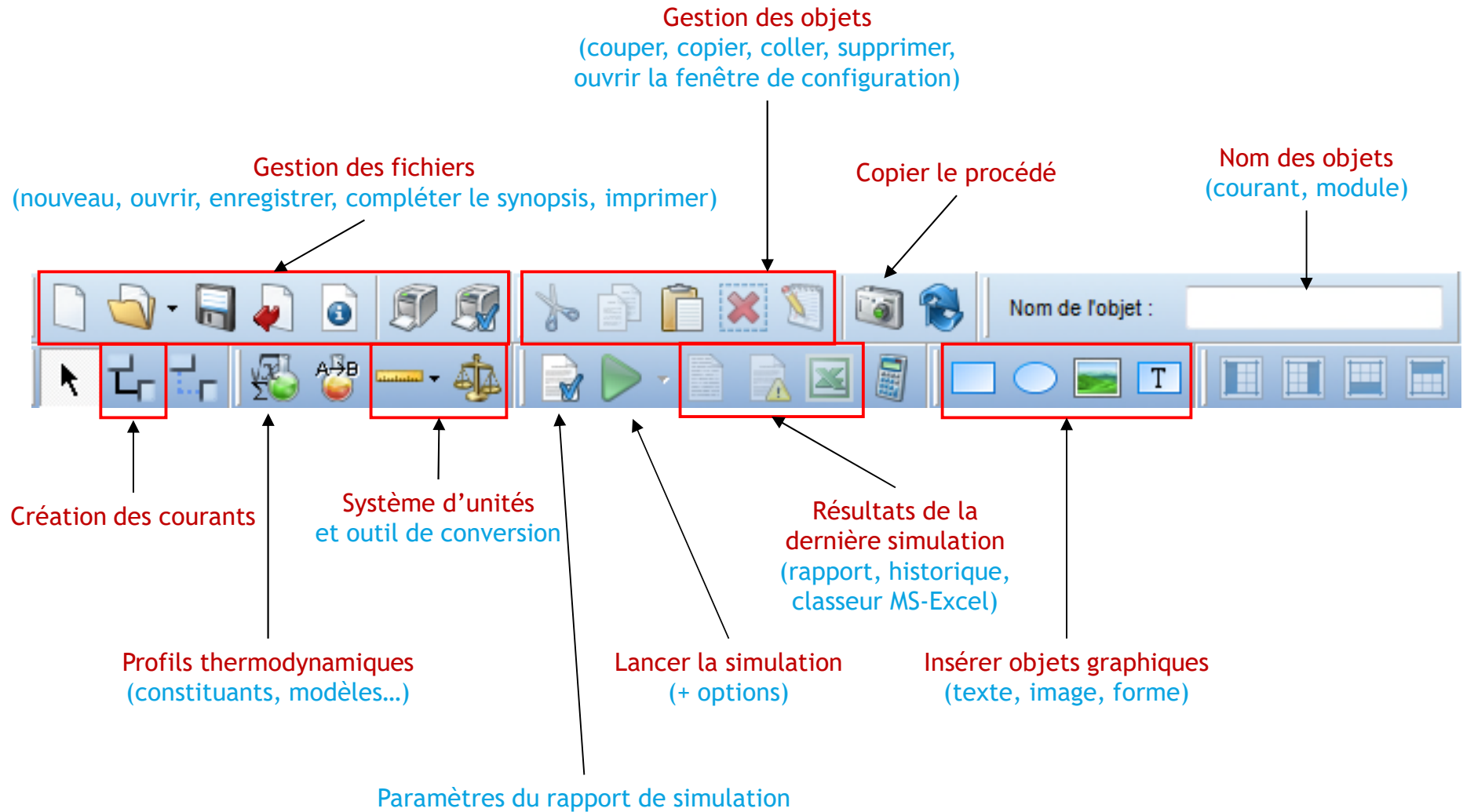
Liste des catégories

Modules à l'intérieur de chaque catégorie



Zone de dessin

# Prérequis : Présentation de l'interface



# Prérequis : Présentation de l'interface

## ■ Gestion des objets graphiques



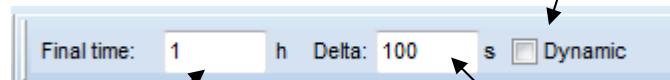
Disposition des modules sur le flowsheet  
(aligner, centrer...)

Position des modules ou des objets graphiques  
(miroir, inverser, retourner, ordonner...)



Les menus de gestion des objets graphiques sont accessibles par un clic-droit sur un objet graphique depuis le flowsheet.

## ■ Gestion du temps de simulations



Durée totale de la simulation

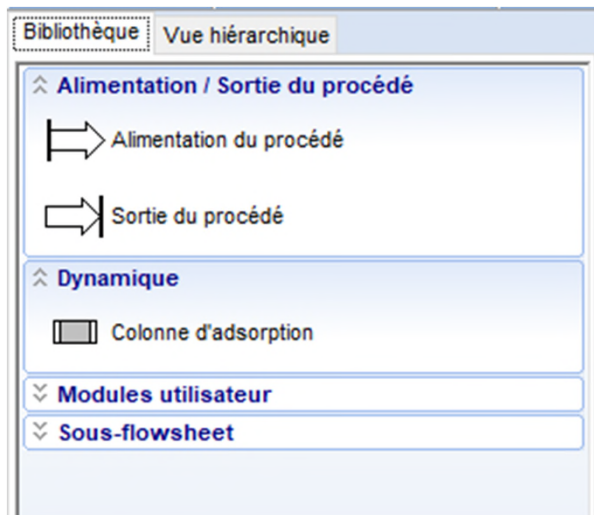
Durée de la simulation pour un module donné

Cochez cette case pour lancer une simulation dynamique

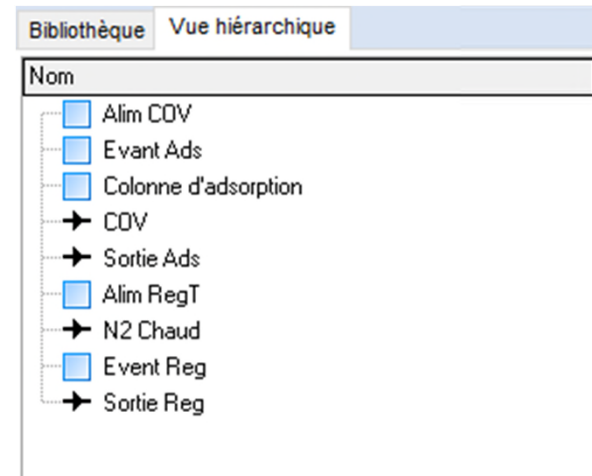


# Prérequis : Présentation de l'interface

- Bibliothèque des modules ou vue hiérarchique.
  - En plus de la bibliothèque présentant tous les modules disponibles dans ProSim DAC pour une catégorie donnée, la vue hiérarchique liste les éléments (courants et modules) utilisés dans le flowsheet.
  - La sélection d'un ou de plusieurs éléments (à l'aide du bouton Ctrl) dans la liste les sélectionne dynamiquement sur le flowsheet. Un double-clic sur un des éléments de la liste permet d'ouvrir la fenêtre de configuration correspondante.



Bibliothèque

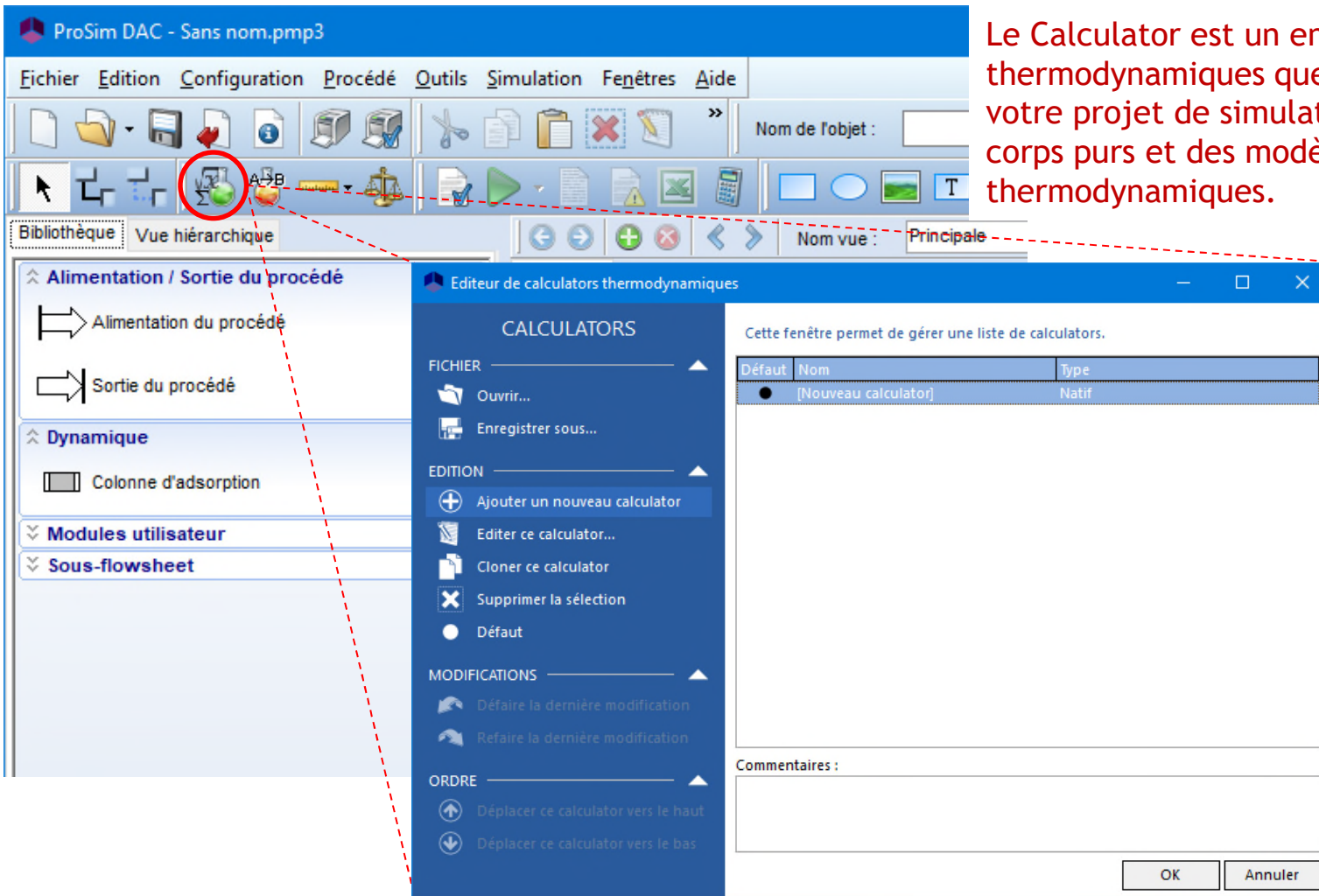


Vue hiérarchique

# Construire le flowsheet

- Les étapes sont les suivantes :
  - Etape 1 : Sélectionnez vos constituants
  - Etape 2 : Sélectionnez votre profil thermodynamique
  - Etape 3 : Créez votre flowsheet
  - Etape 4 : Lancez la simulation
  - Etape 5 : Analysez les résultats de la simulation
  - Etape 6 : Partagez la simulation

# Etape 1 : Sélectionnez vos constituants



The screenshot shows the ProSim DAC interface. In the main toolbar, the icon representing thermodynamic and constituents (a globe with a balance scale) is circled in red. A red dashed line connects this icon to the 'Editeur de calculators thermodynamiques' window. This window has a menu on the left with options like 'Ouvrir...', 'Enregistrer sous...', 'Ajouter un nouveau calculator', etc. The main area of the window contains a table of calculators.

Défaut	Nom	Type
<input checked="" type="radio"/>	[Nouveau calculator]	Natif

Below the table is a 'Commentaires :' text area and 'OK' and 'Annuler' buttons.

Le Calculator est un ensemble de données thermodynamiques que vous utiliserez dans votre projet de simulation, incluant des corps purs et des modèles thermodynamiques.

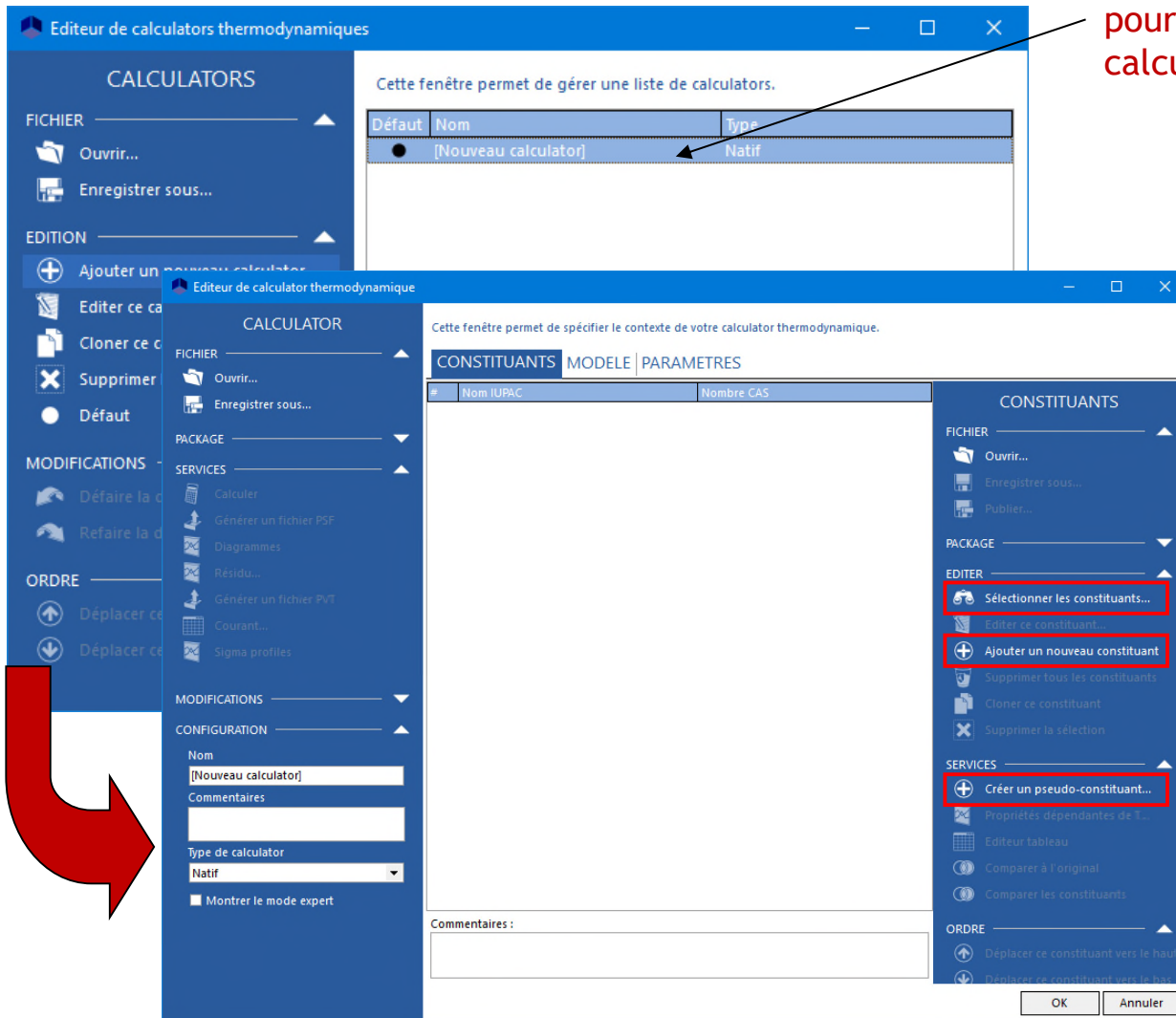
Cliquez sur l'icône *Thermodynamique et constituants* pour ouvrir l'éditeur de calculators thermodynamiques



**Vous pouvez utiliser plusieurs calculators dans la même simulation**



# Etape 1 : Sélectionnez vos constituants



Double-cliquez sur *Nouveau calculator* pour ouvrir la fenêtre de l'éditeur de calculator.

Pour chercher un constituant dans l'une des bases de données, cliquez sur *Sélectionner les constituants*.

Pour créer intégralement un constituant avec vos propres propriétés, cliquez sur *Ajouter un nouveau constituant*.

Pour créer des pseudo-constituants, sans lights ends, cliquez sur *Créer un pseudo-constituant*.

# Etape 1 : Sélectionnez vos constituants

Entrez le nom du constituant que vous recherchez ou sélectionnez un autre critère de recherche, puis cliquez sur **Recherche**.

Cochez cette case pour effacer les résultats précédents.

Les bases de données enregistrées sur votre ordinateur apparaissent ici. Sélectionnez la plus récente.

**Résultats de recherche**

**CONSTITUANTS**

**CRITÈRES**

**Recherche**

Nom ou synonyme  
dichloromethane

☒ Nom exact

☐ Numéro CAS

☐ Formule chimique

☐ ID spécifique

☐ Avancé

**OPTIONS**

☒ Effacer les résultats précédents

**RECHERCHER DANS**

- ☒ Tous les serveurs
  - ☐ Simulis® Compounds Files
    - ☐ Common files
      - ☐ DIPPR L18+
      - ☐ HNO3
      - ☐ Sponsor 05-2018
      - ☐ Standard 2007
      - ☐ Standard 2009
      - ☐ Standard 2011
      - ☐ Standard 2013
      - ☐ Standard 2015
      - ☒ Standard 2017
      - ☐ User files

**Nom : DICHLOROMETHANE**  
Emplacement : Standard 2017 (Simulis® Compounds Files\Common files)  
Numéro CAS : 75-09-2  
ID spécifique : [D1D2AA11-84EB-4CF1-B077-CSAA5F6FC7D9]

**Résultats de recherche** Favoris Historique

#	Nom IUPAC (ou nom d...)	Formule chimi	Numéro	Masse molaire ...	Température d...
1	DICHLOROMETHANE	CH2Cl2	75-09-2	84,9326	312,900

**Constituants sélectionnés :**

Nom  
DICHLOROMETHANE

Les résultats de recherche sont affichés dans la zone centrale.

Double-cliquez sur le constituant voulu pour le sélectionner. La sélection sera affichée dans la zone de droite.

Renouvelez l'opération pour sélectionner les constituants nécessaires.  
Pour cet exemple, vous avez besoin du dichlorométhane et de l'azote.

# Etape 2 : Sélectionnez votre profil thermodynamique

Une fois que tous les constituants sont sélectionnés, fermez la fenêtre de recherche des constituants afin de retourner dans l'éditeur de calculator. Cliquez sur l'onglet *Modèle* pour définir le profil thermodynamique.

Sélectionnez le modèle thermodynamique à l'aide de la liste déroulante. Dans cet exemple, le profil utilisé est « Idéal ».

**Editeur de calculator thermodynamique**

Cette fenêtre permet de spécifier le contexte de votre calculator thermodynamique.

**CONSTITUANTS** **MODELE** PARAMETRES

Nom:

Catégorie:

Profil:

Type d'approche:

Equation d'état:

Fonction alpha:

Règles de mélange:

Modèle des coefficients d'activité:

Fugacité liquide pur état standard:

Volume molaire liquide:

Propriétés de transport:

Calcul enthalpique:

Modèle thermodynamique utilisateur:

Index du modèle:

Commentaires:

**MODELE THERMODYNAMIQUE**

**CONFIGURATION**

☐ Paramètres

☐ Assistant thermodynamique

☐ Aide thermodynamique

☐ Utiliser un modèle spécifique eau pure

**Avancé**

☒ Modèle eau-hydrocarbures

Sol A:

Sol B:

☒ Prise en compte de la démixtion

☐ Paramètres du modèle prédictif..

☒ Modèle en espèces vraies

☐ Paramètres du modèle réactif..

OK Annuler

# Etape 3 : Créez le flowsheet

- A. Construire le flowsheet
- B. Connecter tous les modules avec des courants matières
- C. Configurer les entrées et les sorties
- D. Configurer la colonne d'adsorption
- E. Configurer la durée opératoire



# Etape 3 : Créez le flowsheet

## A- Construire le flowsheet

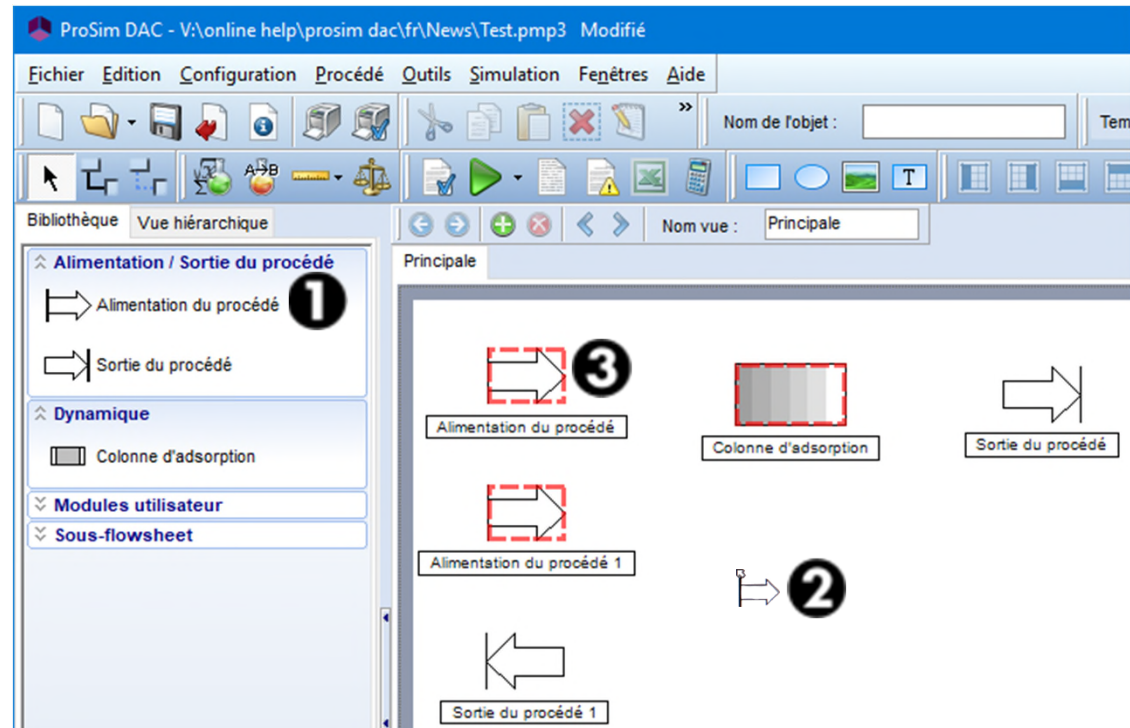
Deux alimentations du procédé, deux sorties du procédé et une colonne d'adsorption sont nécessaires pour cet exemple.

1- Cliquez sur l'icône « Alimentation du procédé » dans la catégorie « Alimentation / Sortie du procédé » pour sélectionner une opération unitaire d'alimentation du procédé.

2- Déplacez la souris vers la zone de dessin, puis déposez-ici le module à l'endroit voulu.

3- Cliquez pour relâcher le module.

4- Répétez pour ajouter la seconde alimentation du procédé, les deux sorties du procédé et la colonne d'adsorption.



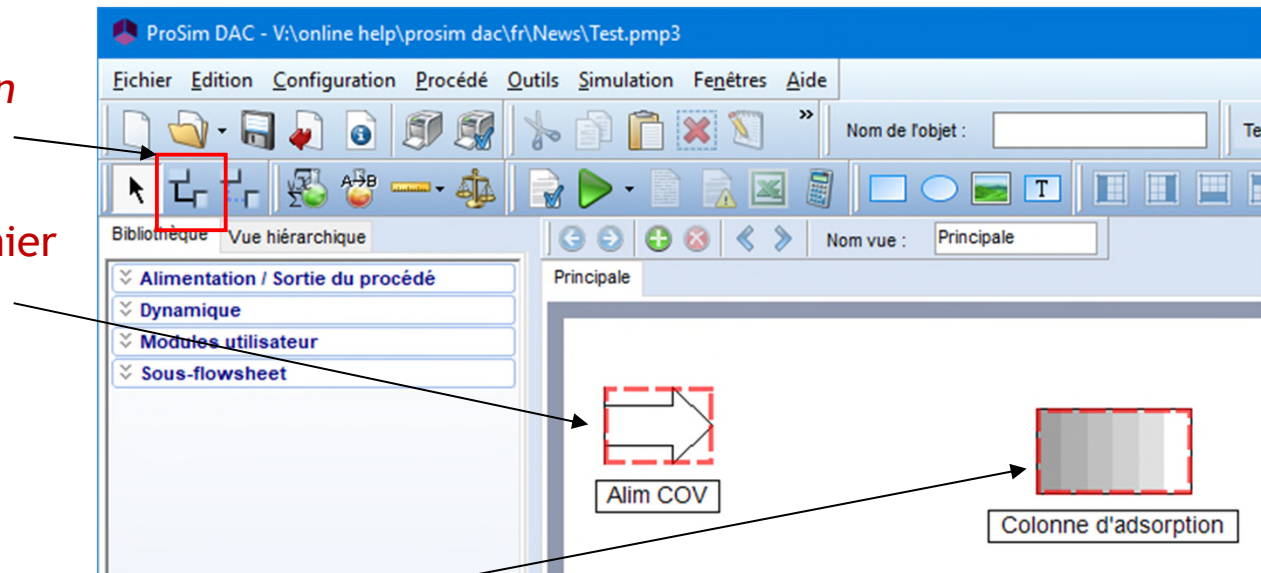
De nombreuses fonctionnalités vous permettent de modifier la taille, d'aligner, de procéder à des rotations, des repositionnements, des éléments sélectionnés sur la zone de dessin.



# Etape 3 : Créez le flowsheet

## B- Connecter les modules

1. Cliquez sur l'icône *Créer un courant matière*.
2. Cliquez ensuite sur le premier module (source).
3. Cliquez ensuite sur le deuxième module (cible).



# Etape 3 : Créez le flowsheet

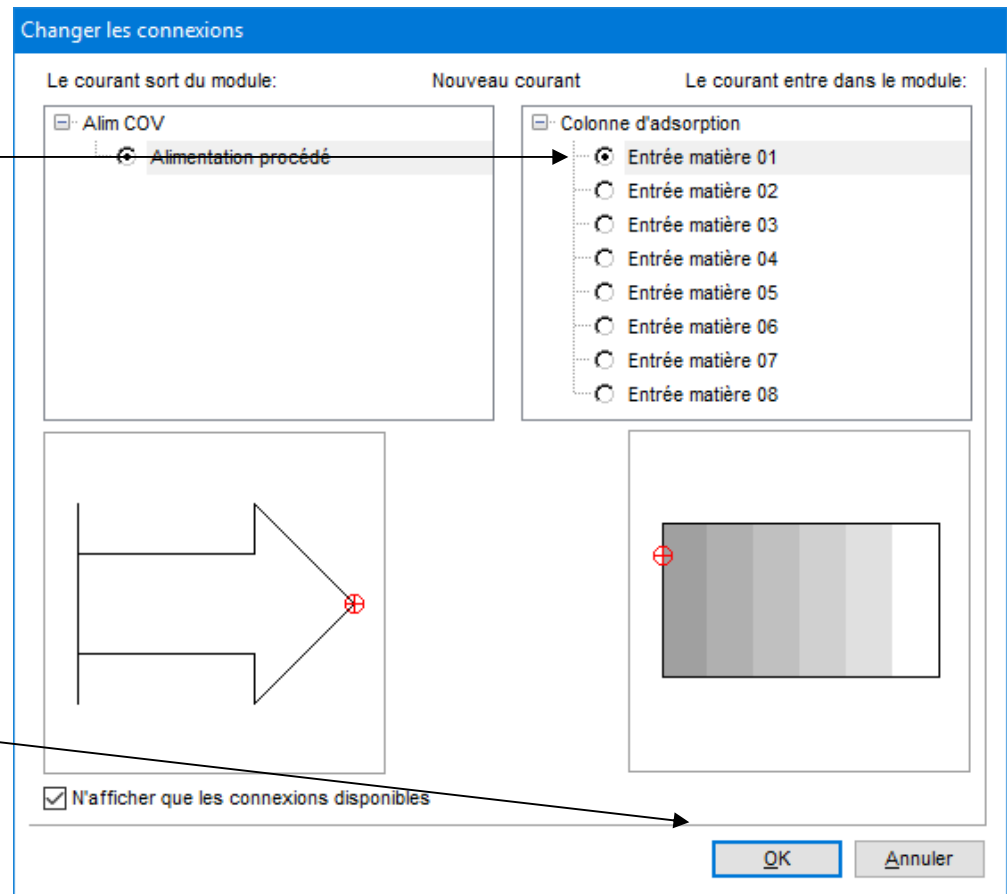
## B- Connecter les modules

Plusieurs options de connexion sont possibles pour les entrées et les sorties du module colonne d'adsorption

1. Sélectionnez l'entrée (ici *Entrée matière 01*). Ce choix est uniquement utilisé pour l'affichage graphique.

2. Cliquez sur *OK*

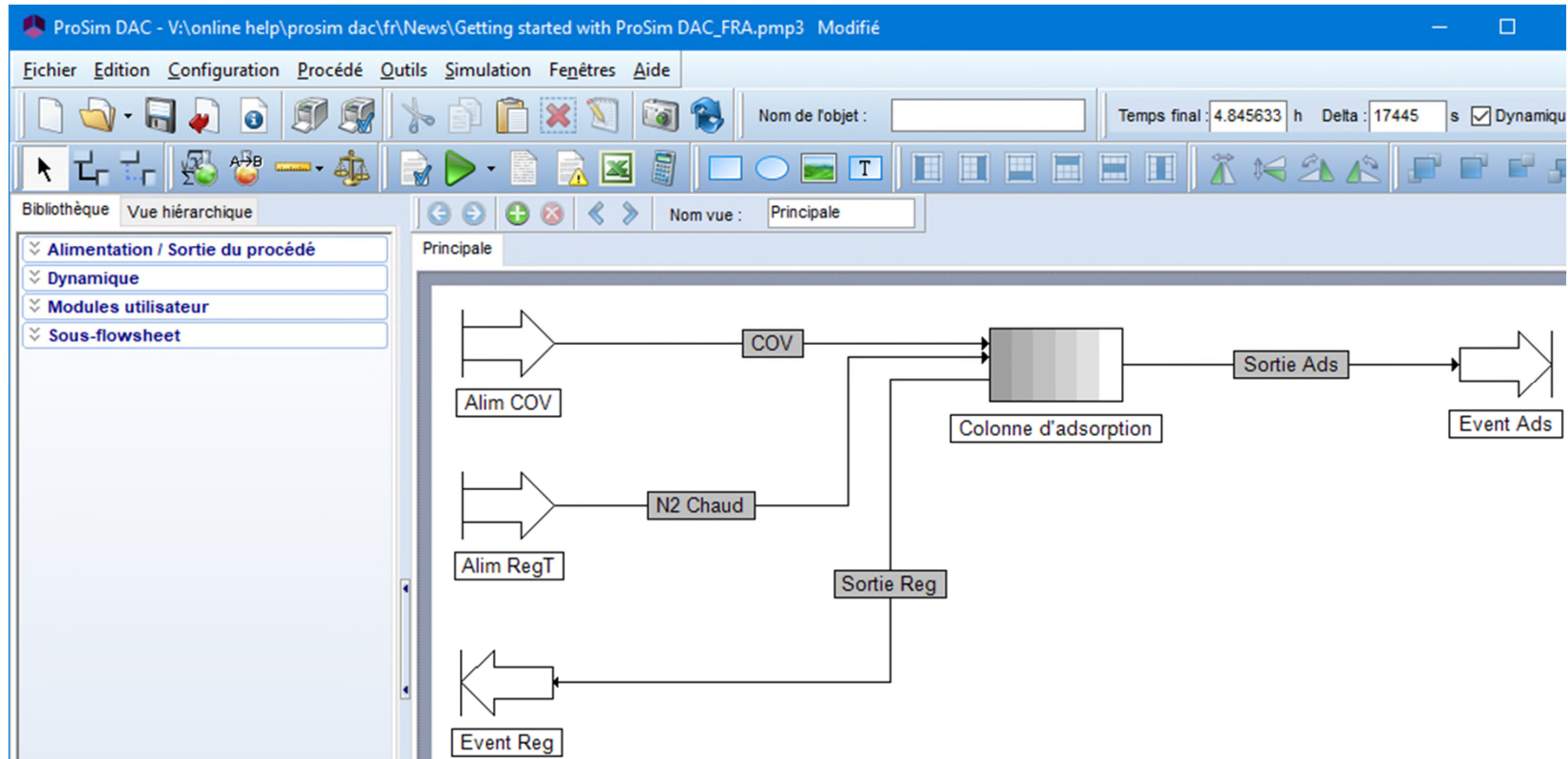
3. Répétez pour les différents courants matières



# Etape 3 : Créez le flowsheet

## B- Connecter les modules

16



Les courants matières peuvent être colorés pour faciliter la compréhension du flowsheet. Faites un clic droit sur le courant et sélectionnez l'option *Couleur du courant*.

# Etape 3 : Créez le flowsheet

## C- Entrées et sorties

Pour configurer une alimentation du procédé :

1. Double-cliquez sur l'icône correspondante ou sélectionnez l'option Éditer depuis le menu qui s'affiche lorsque vous faites un clic-droit sur l'icône.
2. Cliquez sur l'onglet Paramètres.

The screenshot displays the ProSim DAC software interface. The main window shows a hierarchical view of the process flow. A context menu is open over the 'Alim COV' stream, with the 'Editer...' option selected. The 'Paramètres' tab is active in the 'Entrée du procédé (\$ALIM)' dialog box. The 'Fractions molaires' table is visible, showing the composition of the input stream.

**ProSim DAC - V:\online help\prosim dac\fr\News\Getting started with ProSim DAC\_FRA.pmp3 Modifié**

Fichier Edition Configuration Procédé Outils Simulation Fenêtres Aide

Nom de l'objet : Alim COV

Nom vue : Principale

Bibliothèque Vue hiérarchique

- Alimentation / Sortie du procédé
- Dynamique
- Modules utilisateur
- Sous-flowsheet

Principale

1

Editer...

- Thermodynamique
- Visuel...
- Mettre le visuel à jour depuis le fichier par défaut
- Afficher une étiquette
- Scriptlets
- Déplacer vers
- Remonter au premier plan
- Remonter
- Descendre
- Descendre à l'arrière plan

2

Paramètres Scripts Rapport Courants Notes Paramètres

Copier Coler Données tabulées...

Débits et fractions Température et Pression

Spécification pour le débit Fractions molaires

#	Constituants	Fractions molaires
1	DICHLOROMETHANE	0.0078
2	NITROGEN	0.9922

Somme : 1.0000 1 - somme : 0.0000

Débit Total Débit molaire

Débit molaire total 0.0839900000 kmol/h

Liaison : ...

OK Annuler



# Etape 3 : Créez le flowsheet

## C- Entrées et sorties

- Caractéristiques de l'alimentation en COV

Entrée du procédé (SALIM)

Nom:

Desc:

Identification Paramètres Scripts Rapport Courants Notes Paramètr

☐

Débits et fractions Température et Pression

Spécification pour le débit

Fractions molaires

#	Constituants	Fractions molaires
1	DICHLOROMETHANE	0.0078
2	NITROGEN	0.9922

Somme :  1 - somme :

Débit Total

Débit molaire total

Liaison :

Changer le nom par défaut (option)

Sélectionner "Fractions molaires"

Fournir les fractions molaires

Sélectionner "Débit molaire"

Fournir le débit molaire



# Etape 3 : Créez le flowsheet

## C- Entrées et sorties

### ■ Caractéristiques de l'alimentation en COV

Entrée du procédé (\$ALIM)

Nom: Alim COV

Desc :

Identification Paramètres Scripts Rapport Courants Notes Paramètr

Copier Coller Données tabulées...

Débits et fractions **Température et Pression**

**Température** Pression

Spécification pour la Température

☒ Température fournie par l'utilisateur

☐ Température de bulle à pression spécifiée

☐ Température de rosée à pression spécifiée

Température 24 °C

☐ Etat physique du courant Courant liquide

☐ Modèle thermodynamique spécifique à l'Eau

Liaison :

OK Annuler

Spécifier la température

Spécifier la pression

Entrée du procédé (\$ALIM)

Nom: Alim COV

Desc :

Identification Paramètres Scripts Rapport Courants Notes Paramètr

Copier Coller Données tabulées...

Débits et fractions **Température et Pression**

Température **Pression**

Spécification pour la Pression

☒ Pression fournie par l'utilisateur

☐ Pression de bulle à température spécifiée

☐ Pression de rosée à température spécifiée

Pression 1 atm

☐ Etat physique du courant Courant liquide

☐ Modèle thermodynamique spécifique à l'Eau

Liaison :

OK Annuler

# Etape 3 : Créez le flowsheet

## C- Entrées et sorties

- Caractéristiques de l'alimentation en azote chaud (pour la régénération)

Entrée du procédé (SALIM1)

Nom:

Desc:

Identification Paramètres Scripts Rapport Courants Notes Paramétr

☐

Débits et fractions **Température et Pression**

Spécification pour le débit Fractions molaires

Fractions molaires

#	Constituants	Fractions molaires
1	DICHLOROMETHANE	0
2	NITROGEN	1

Somme :  1 - somme :

Débit Total Débit molaire

Débit molaire total  kmol/h

Liaison :

Changer le nom par défaut (option)

Sélectionner "Fractions molaires"

Fournir les fractions molaires

Sélectionner "Débit molaire"

Fournir le débit molaire

# Etape 3 : Créez le flowsheet

## C- Entrées et sorties

- Caractéristiques de l'alimentation en azote chaud (pour la régénération)

Entrée du procédé (\$ALIM1)

Nom: Alim RegT

Desc :

Identification Paramètres Scripts Rapport Courants Notes Paramètr

Copier Coller Données tabulées...

Débits et fractions **Température et Pression**

**Température** Pression

Spécification pour la Température

☒ Température fournie par l'utilisateur

☐ Température de bulle à pression spécifiée

☐ Température de rosée à pression spécifiée

Température 170 °C

☐ Etat physique du courant Courant liquide

☐ Modèle thermodynamique spécifique à l'Eau

Liaison :

OK Annuler

Spécifier la température

Spécifier la pression

Entrée du procédé (\$ALIM1)

Nom: Alim RegT

Desc :

Identification Paramètres Scripts Rapport Courants Notes Paramètr

Copier Coller Données tabulées...

Débits et fractions **Température et Pression**

Température **Pression**

Spécification pour la Pression

☒ Pression fournie par l'utilisateur

☐ Pression de bulle à température spécifiée

☐ Pression de rosée à température spécifiée

Pression 1 atm

☐ Etat physique du courant Courant liquide

☐ Modèle thermodynamique spécifique à l'Eau

Liaison :

OK Annuler

# Etape 3 : Créez le flowsheet

## C- Entrées et sorties

- Sorties du procédé
  - Aucun paramètre n'est demandé pour les sorties du procédé.

Sortie du procédé (\$SORP)

Nom:

Desc :

Identification Paramètres Scripts Rapport Courants Notes

Connexions

Entrée	Sortie
Matière <ul style="list-style-type: none"><li>Sortie Ads</li><li>Colonne d'adsorption</li></ul>	

Modèle thermodynamique:

OK Annuler

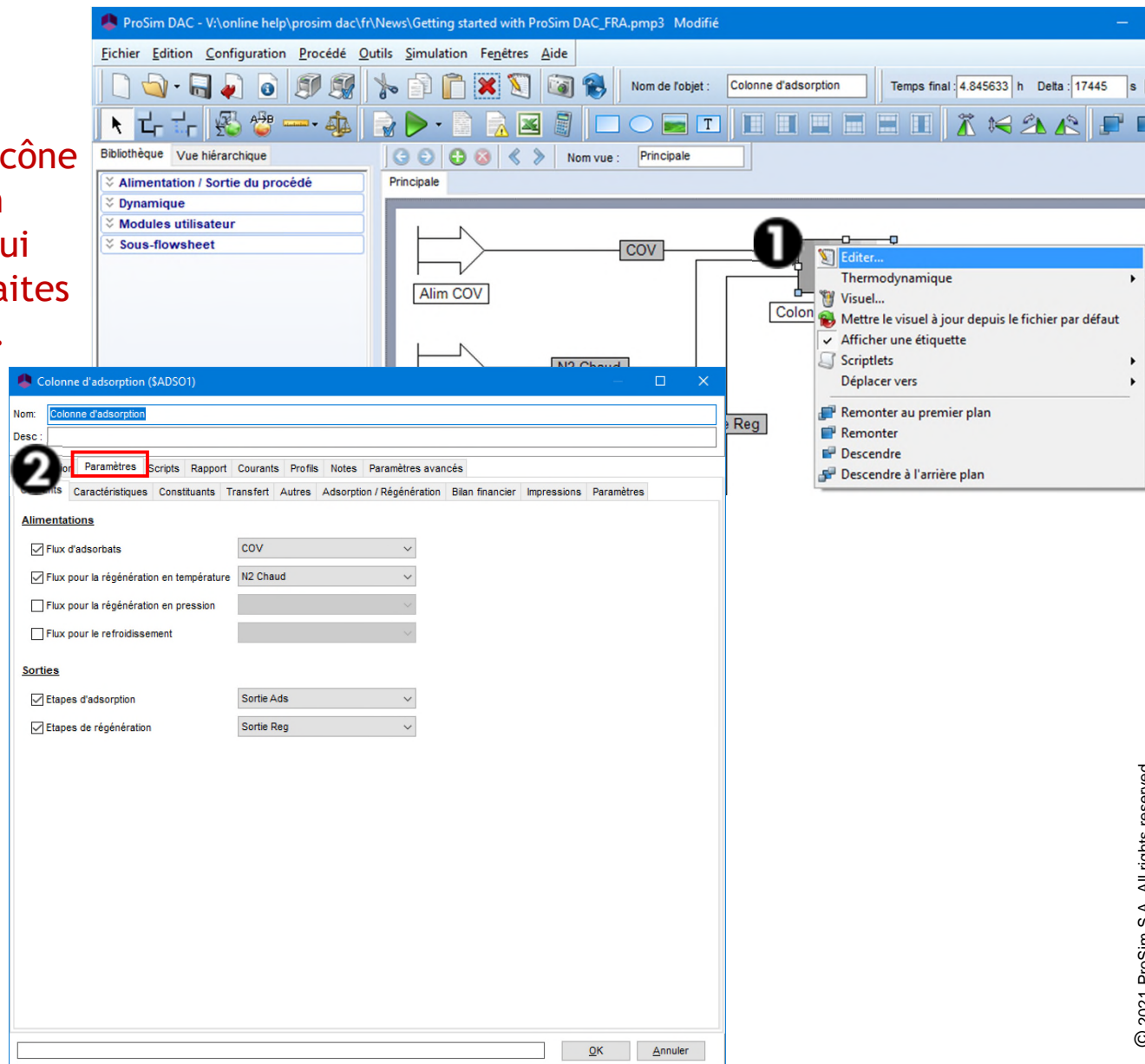


# Etape 3 : Créez le flowsheet

## D- Colonne d'adsorption

Pour configurer la colonne d'adsorption :

1. Double-cliquez sur son icône ou sélectionnez l'option Éditer depuis le menu qui s'affiche lorsque vous faites un clic-droit sur l'icône.
2. Cliquez sur l'onglet Paramètres.





# Etape 3 : Créez le flowsheet

## D- Colonne d'adsorption

- Onglet « Courants »
  - Identifier les courants de chaque usage

Colonne d'adsorption (\$ADS01)

Nom: Colonne d'adsorption

Desc :

Identification Paramètres Scripts Rapport Courants Profils Notes Paramètres avancés

**Courants** Caractéristiques Constituants Transfert Autres Adsorption / Régénération Bilan financier Impressions Paramètres

Alimentations

☒ Flux d'adsorbats COV

☒ Flux pour la régénération en température N2 Chaud

☐ Flux pour la régénération en pression

☐ Flux pour le refroidissement

Sorties

☒ Etapes d'adsorption Sortie Ads

☒ Etapes de régénération Sortie Reg

OK Annuler

# Etape 3 : Créez le flowsheet

## D- Colonne d'adsorption

- Onglet « Caractéristiques »
  - Fournir les caractéristiques principales de la colonne

Taille du lit

The screenshot shows the 'Colonne d'adsorption (\$ADS01)' window with the 'Caractéristiques' tab selected. The 'Edit...' button is highlighted with a red box. A red dashed line points from this button to a secondary window titled 'Colonne à flux longitudinal'. This secondary window displays the column dimensions: Diameter (D) = 5 cm and Length (L) = 27.5 cm. A diagram of the column is shown with a red arrow indicating flow direction and a blue arrow indicating the outlet. The diagram also shows the diameter (D) and length (L) of the column.

# Etape 3 : Créez le flowsheet

## D- Colonne d'adsorption

- Onglet « Caractéristiques »
  - Fournir les caractéristiques principales de la colonne

Colonne d'adsorption (\$ADS01)

Nom: Colonne d'adsorption  
Desc :

Identification Paramètres Scripts Rapport Courants Profils Notes Paramètres avancés

Courants **Caractéristiques** Constituants Transfert Autres Adsorption / Régénération Bilan financier Impressions Paramètres

**Colonne**

Type de colonne Colonne à flux longitudinal  
[Modifier...]

Transfert thermique Q donnée et transfert à la paroi

Température de la paroi 22 °C

**Adsorbant** [Charger...]

Degré de vide du lit 0.37 m³/m³

Diamètre des particules 4 mm

Densité des particules 750 kg/m³

Chaleur spécifique du solide 1050 J/kg/K

Rapport surface/volume 1500 m²/m³

**Conditions (T,P) des mesures**

Conditions Normales

**Initialisation**

Type d'initialisation fournie par l'utilisateur

Pression initiale 1 atm

Température initiale 20 °C

Fractions molaires initiales

1	DICHLOROMETHANE	0
2	NITROGEN	1

Somation 1.0000

OK Annuler

Base de données  
d'adsorbants

T, P de référence pour  
les concentrations

Etat de la colonne  
avant la première  
adsorption

# Etape 3 : Créez le flowsheet

## D- Colonne d'adsorption

- Onglet « Constituants »
  - Fournir l'isotherme d'adsorption du dichlorométhane et son enthalpie d'adsorption

Colonne d'adsorption (SADSO1)

Nom: Colonne d'adsorption

Desc :

Identification Paramètres Scripts Rapport Courants Profils Notes Paramètres avancés

Courants Caractéristiques **Constituants** Transfert Autres Adsorption / Régénération Bilan financier Impressions Paramètres

**Caractéristiques**

DICHLOROMETHANE  
NITROGEN

**Enthalpie d'adsorption**

Enthalpie d'adsorption Fourni

Chaleur d'adsorption -51 kJ/mol **Charger...**

**Isotherme d'adsorption**

Corrélation Langmuir

$$q_i = \frac{\left[ q_{m0} \exp\left(\frac{q_{m1}}{T}\right) \right] \left[ K_0 \exp\left(\frac{K_1}{T}\right) \right] P_i}{\left( 1 + \left[ K_0 \exp\left(\frac{K_1}{T}\right) \right] P_i \right)}$$

qm0 1.094644264 mol/kg **Charger...**

K0 0.045997002 atm<sup>-1</sup>

qm1 628.3009558 K

K1 2427.456107 K

OK Annuler

Bases de données  
d'enthalpies et  
d'isothermes  
d'adsorption

# Etape 3 : Créez le flowsheet

## D- Colonne d'adsorption

- Onglet « Constituants »
  - Fournir l'isotherme d'adsorption du dichlorométhane et son enthalpie d'adsorption

Colonne d'adsorption (\$ADS01)

Nom: Colonne d'adsorption

Desc :

Identification Paramètres Scripts Rapport Courants Profils Notes Paramètres avancés

Courants Caractéristiques **Constituants** Transfert Autres Adsorption / Régénération Bilan financier Impressions Paramètres

**Caractéristiques**

DICHLOROMETHANE  
 ➔ NITROGEN

**Enthalpie d'adsorption**

Enthalpie d'adsorption Fourni

Chaleur d'adsorption 0 cal/mol Charger...

**Isotherme d'adsorption**

Corrélation Langmuir

$$q_i = \frac{\left[ q_{m0} \exp\left(\frac{q_{m1}}{T}\right) \right] \left[ K_0 \exp\left(\frac{K_1}{T}\right) \right] P_i}{1 + \left[ K_0 \exp\left(\frac{K_1}{T}\right) \right] P_i}$$

qm0	0	mol/kg	Charger...
K0	0	atm <sup>-1</sup>	
qm1	0	K	
K1	0	K	

OK Annuler

L'azote est supposé  
inerte (c'est-à-dire ne  
s'adsorbant pas)



# Etape 3 : Créez le flowsheet

## D- Colonne d'adsorption

- Onglet « Transfert »
  - Sélectionner les modèles pour les transferts de matière et de chaleur

Colonne d'adsorption (\$ADS01)

Nom: Colonne d'adsorption

Desc :

Identification Paramètres Scripts Rapport **Courants** Profils Notes Paramètres avancés

Courants Caractéristiques Constituants **Transfert** Autres Adsorption / Régénération Bilan financier Impressions Paramètres

**Transfert de matière**

Type de transfert: Transfert gaz et solide

**Transfert de matière phase gaz**

Type de transfert gaz: kf calculé, Petrovic-Thodos

**Transfert de matière phase solide**

Type de transfert solide: kf fourni

Coefficients de transfert de matière phase solide ( $s^{-1}$ )

1	DICHLOROMETHANE	0.1
2	NITROGEN	0

**Transfert thermique**

☒ Bilans enthalpiques ?

Gaz-adsorbant: Calculé (Satterfield)

Gaz-paroi: Calculé (Leva)

**Inertie thermique de la paroi**

☐ Prise en compte de l'inertie thermique de la paroi

Masse (paroi): 0 kg

Chaleur spécifique (paroi): 0 cal/g/K

Epaisseur (paroi): 0 m

Conductivité thermique: 0 W/m/K

Coefficient de transfert paroi-extérieur: Fourni

Coefficient: 4.000000956022 kca/h/m<sup>2</sup>/K

OK Annuler

# Etape 3 : Créez le flowsheet

## D- Colonne d'adsorption

- Onglet « Autres »
  - Sélectionner le modèle thermodynamique d'adsorption

Colonne d'adsorption (\$ADSO1)

Nom: Colonne d'adsorption

Desc :

Identification Paramètres Scripts Rapport Courants Profils Notes Paramètres avancés

Courants Caractéristiques Constituants Transfert **Autres** Adsorption / Régénération Bilan financier Impressions Paramètres

**Vanne**

☐ Présence d'une vanne en sortie

Etat au démarrage: Ouvrir

Pression à l'ouverture: 0 atm

Coefficient de fêquation: 1E-6

**Colonne**

Pression de sortie: 1 atm

**Thermodynamique**

Modèle d'adsorption: Modèle simple

OK Annuler

# Etape 3 : Créez le flowsheet D- Colonne d'adsorption

- Onglet « Adsorption / Régénération »
  - Sélectionner le cycle TSA (Adsorption + régénération en température)

Colonne d'adsorption (\$ADS01)

Nom: Colonne d'adsorption

Desc :

Identification Paramètres Scripts Rapport Courants Profils Notes Paramètres avancés

Courants Caractéristiques Constituants Transfert Autres **Adsorption / Régénération** Bilan financier Impressions Paramètres

**Adsorption et régénération**

Type de séquence: **Adsorption + régénération en température**

Adsorption seule  
**Adsorption + régénération en température**  
 Adsorption + régénération en pression  
 Adsorption + régénération en pression + régénération en température  
 Adsorption + régénération en température + régénération en pression

**Adsorption** Paramètres... Événements...

**Régénération en température** Paramètres... Événements...

**Fin de la simulation** Événements...

Flowsheet diagram:

```

graph TD
    A[A] --> EVA((EVA))
    EVA --> RT[RT]
    RT --> EVT((EVT))
    EVT --> A
  
```

A: Adsorption  
 EVA: Evénements de fin d'adsorption  
 RT: Régénération en température  
 EVT: Evénements de fin de régénération en température

OK Annuler

# Etape 3 : Créez le flowsheet D- Colonne d'adsorption

- Onglet « Adsorption / Régénération »
  - Fournir les paramètres de l'étape d'adsorption

Colonne d'adsorption (\$ADS01)

Nom: Colonne d'adsorption

Desc :

Identification Paramètres Scripts Rapport Courants Profils **Notes** Paramètres avancés

Courants Caractéristiques Constituants Transfert Autres **Adsorption / Régénération** Bilan financier Impressions Paramètres

**Adsorption et régénération**

Type de séquence: Adsorption + régénération en température

**Adsorption**

Paramètres... Événements...

**Régénération en température**

Paramètres... Événements...

**Fin de la simulation**

Événements...

Flowsheet diagram:

```

graph TD
    A[A: Adsorption] --> EVA((EVA: Événements de fin d'adsorption))
    EVA --> RT[RT: Régénération en température]
    RT --> EVT((EVT: Événements de fin de régénération en température))
    EVT --> A
  
```

OK Annuler

Paramètres d'adsorption

**Paramètres**

☐ Refroidissement de la colonne par la paroi

Température de la paroi: 0 K

Quantité de chaleur échangée dans le lit: 0 kcal/h

Valeur positive pour un chauffage, négative pour un refroidissement.

OK Annuler



# Etape 3 : Créez le flowsheet

## D- Colonne d'adsorption

- Onglet « Adsorption / Régénération »
  - Fournir les paramètres de l'événement qui stoppe l'étape d'adsorption

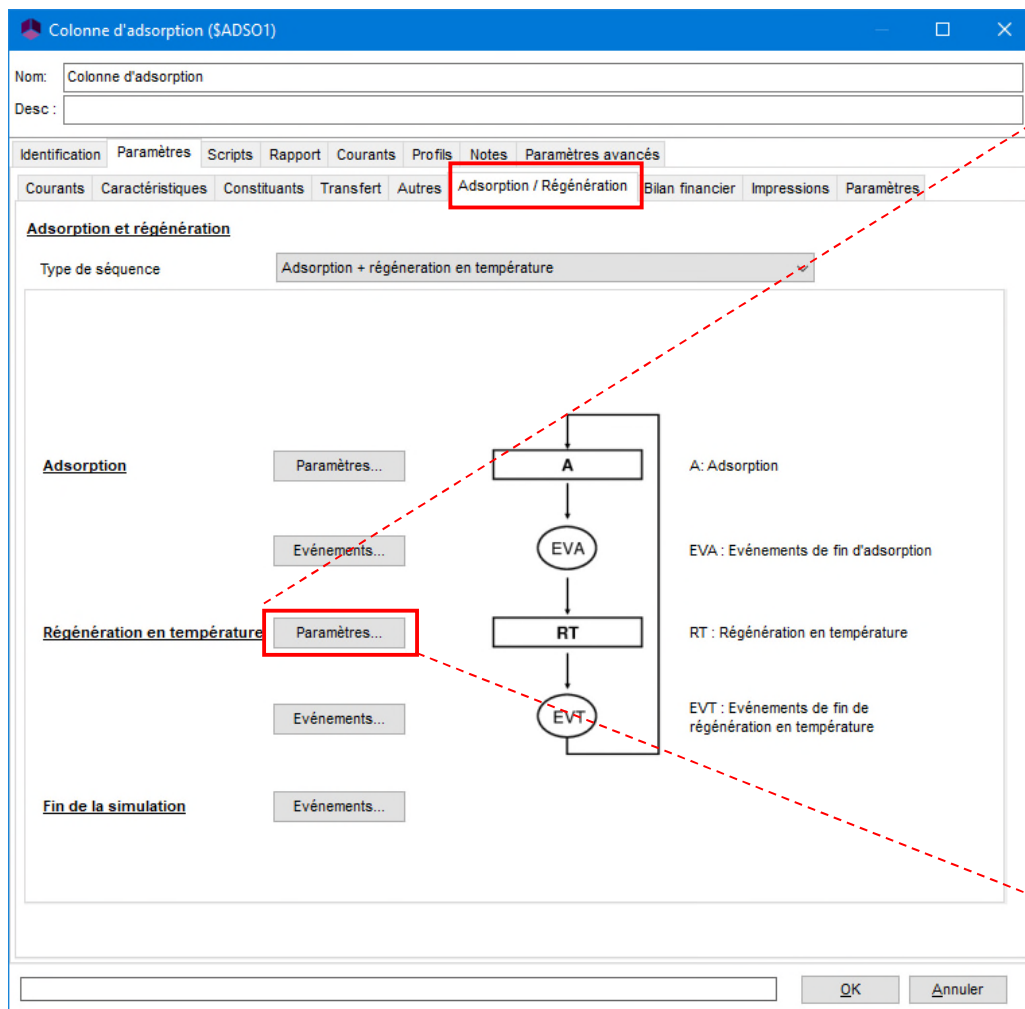
The screenshot displays the 'Colonne d'adsorption (\$ADS01)' window. The 'Adsorption / Régénération' tab is selected, showing a process flow diagram with blocks A, EVA, RT, and EVT. The 'Evénements d'adsorption' dialog box is open, showing the 'Evénements' section with the following settings:

Événement	Unité	Position	Unité
<input checked="" type="checkbox"/> Durée	12600	s	
<input type="checkbox"/> Percée	0		m
<input type="checkbox"/> Concentration phase gaz	0		mol/l
<input type="checkbox"/> Concentration en phase solide	0		mol/kg
<input type="checkbox"/> Température maximale	0		K
<input type="checkbox"/> Pression maximale	0		atm
Constituant à suivre			

The 'OK' button is highlighted in the dialog box.

# Etape 3 : Créez le flowsheet D- Colonne d'adsorption

- Onglet « Adsorption / Régénération »
  - Fournir les paramètres de l'étape de régénération en température



Paramètres de la régénération en température

**Paramètres**

Type de régénération: Contre-courant

☐ Préchauffage de la colonne

Type de chauffage: Chauffage du lit

Puissance de préchauffage: 0 kcal/h

Durée de préchauffage: 0 h

☐ Refroidissement de la colonne

Durée de refroidissement: 0 h

☐ Temporisation de la colonne

Durée de temporisation: 0 h

Quantité de chaleur échangée dans le lit: 0 kcal/h

Valeur positive pour un chauffage, négative pour un refroidissement.

OK Annuler

# Etape 3 : Créez le flowsheet D- Colonne d'adsorption

- Onglet « Adsorption / Régénération »
  - Fournir les paramètres de l'événement qui stoppe l'étape de régénération en température

The screenshot displays the 'Colonne d'adsorption (\$ADS01)' window in ProSim S.A. The 'Paramètres avancés' tab is active, and the 'Adsorption / Régénération' sub-tab is selected. The 'Type de séquence' is set to 'Adsorption + régénération en température'. The flowsheet diagram shows a sequence of units: 'A' (Adsorption), 'EVA' (Evénement), 'RT' (Régénération en température), and 'EVT' (Evénement). The 'EVA' and 'EVT' units are highlighted with red dashed lines, indicating the focus of the configuration.

The 'Evénements de la régénération en température' dialog box is open, showing the following configuration:

Evénements			
<input checked="" type="checkbox"/> Durée	4845	s	
<input type="checkbox"/> Concentration phase gaz	0	mol/l	Position 0 m
<input type="checkbox"/> Concentration en phase solide	0	mol/kg	Position 0 m
<input type="checkbox"/> Température maximale	0	K	Position 0 m
<input type="checkbox"/> Pression maximale	0	atm	Position 0 m
<input type="checkbox"/> Quantité produite	0	kmol	Position 0 m
Constituant à suivre			

The dialog box includes 'OK' and 'Annuler' buttons at the bottom right.

# Etape 3 : Créez le flowsheet

## D- Colonne d'adsorption

- Onglet « Adsorption / Régénération »
  - Fournir les paramètres de l'événement qui stoppe la simulation

The screenshot displays the 'Colonne d'adsorption (\$ADSO1)' configuration window. The 'Notes' tab is selected, and the 'Adsorption / Régénération' sub-tab is highlighted with a red box. The 'Type de séquence' is set to 'Adsorption + régénération en température'. The flowsheet diagram shows a sequence of steps: Adsorption (A), EVA, Régénération en température (RT), and EVT. The 'Fin de la simulation' step is highlighted with a red box, and its 'Evénements...' button is also highlighted with a red box. A red dashed line connects this button to the 'Evénements de fin de simulation' dialog box.

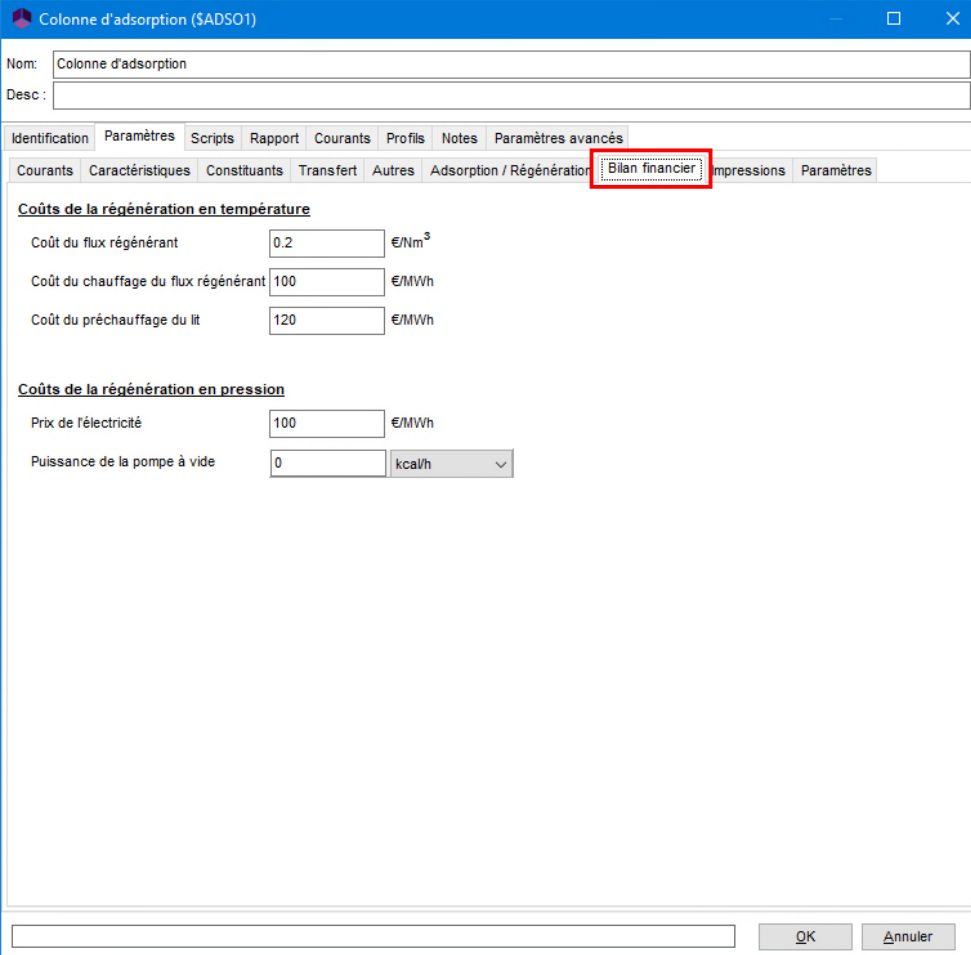
The 'Evénements de fin de simulation' dialog box is open, showing the 'Evénements' section. The 'Temps de fin de simulation' checkbox is checked. The 'Nombre de cycles' is set to 0. The 'Quantité totale produite' is set to 0 kmol. The 'Température maximale' is set to 0 K. The 'Pression maximale' is set to 0 atm. The 'Quantité totale traitée' is set to 0 kmol. The 'Constituant à suivre' is set to an empty dropdown. The 'Position' is set to 0 m for all three parameters. The 'OK' and 'Annuler' buttons are at the bottom right.



# Etape 3 : Créez le flowsheet

## D- Colonne d'adsorption

- Onglet « Bilan financier »
  - Fournir les paramètres utilisés par le bilan financier sur les étapes de régénération



Colonne d'adsorption (\$ADSO1)

Nom: Colonne d'adsorption

Desc :

Identification Paramètres Scripts Rapport Courants Profils Notes Paramètres avancés

Courants Caractéristiques Constituants Transfert Autres Adsorption / Régénération **Bilan financier** Impressions Paramètres

Coûts de la régénération en température

Coût du flux régénérant 0.2 €/Nm<sup>3</sup>

Coût du chauffage du flux régénérant 100 €/MWh

Coût du préchauffage du lit 120 €/MWh

Coûts de la régénération en pression

Prix de l'électricité 100 €/MWh

Puissance de la pompe à vide 0 kcal/h

OK Annuler

# Etape 3 : Créez le flowsheet

## D- Colonne d'adsorption

- Onglet « Impressions »
  - Fournir les paramètres des rapports (résultats dépendants du temps)

Colonne d'adsorption (\$ADS01)

Nom: Colonne d'adsorption

Desc :

Identification Paramètres Scripts Rapport Courants Profils Notes Paramètres avancés

Courants Caractéristiques Constituants Transfert Autres Adsorption / Régénération Bilan financier **Impressions** Paramètres

**Imprimer**

☒ Imprimer les fichiers résultats

Fréquence 60 s

☐ Imprimer les courbes 3D

Fréquence 0.1 h

☒ Impression du courant de sortie avec le pas de temps du module

☒ Impression des données d'entrée

Type de résultats Massique

☐ Détection des inerts

Seuil 1E-6 kmol

OK Annuler

# Etape 3 : Créez le flowsheet

## D- Colonne d'adsorption

- Onglet « Paramètres »
  - Fournir les paramètres numériques et les paramètres du modèle

Colonne d'adsorption (\$ADS01)

Nom: Colonne d'adsorption

Desc :

Identification Paramètres Scripts Rapport Courants Profils Notes Paramètres avancés

Courants Caractéristiques Constituants Transfert Autres Adsorption / Régénération Bilan financier Impressions **Paramètres**

**Intégration**

Pas d'intégration max. 60 s

Pas initial d'intégration 0.005 s

Méthode d'intégration Matrice creuse, évaluation analytique

Nombre de pas 2

Dérivées calculé analytiquement

**Tolérances**

	Relative	Absolute
Concentrations partielles	1E-5	1E-5
Concentrations	0.0001	0.0001
Températures	0.001	0.001
Pressions	0.001	0.001
Enthalpies	0.1	0.1
Vitesse	0.1	0.1

**Paramètres du modèle**

Nombre de cellules de discrétisation 7

Coefficient de dispersion axiale 0 m<sup>2</sup>/s

$\Delta H_{\text{Régénération}} / \Delta H_{\text{Adsorption}}$  (ratio) 1

☒ Prise en compte de l'accumulation de chaleur dans le solide

Quantité de chaleur appliquée au Bilan enthalpique gaz

Durée de la spline cubique 0 h

Transfert solide Fourni

Coefficients de transfert de matière phase solide (s<sup>-1</sup>)

1	DICHLOROMETHANE	0.006
2	NITROGEN	0

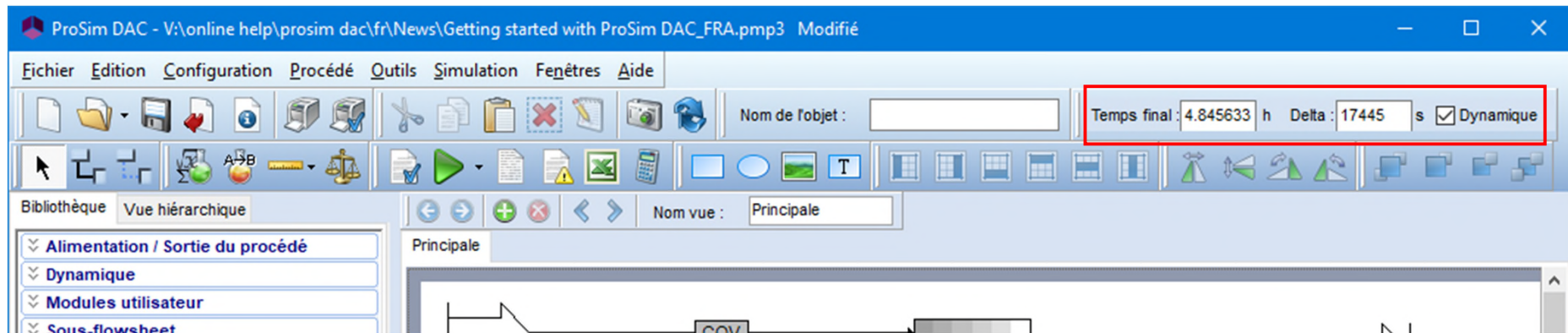
OK Annuler

Nombre de cellules de  
discrétisation  
longitudinale

# Etape 3 : Créez le flowsheet

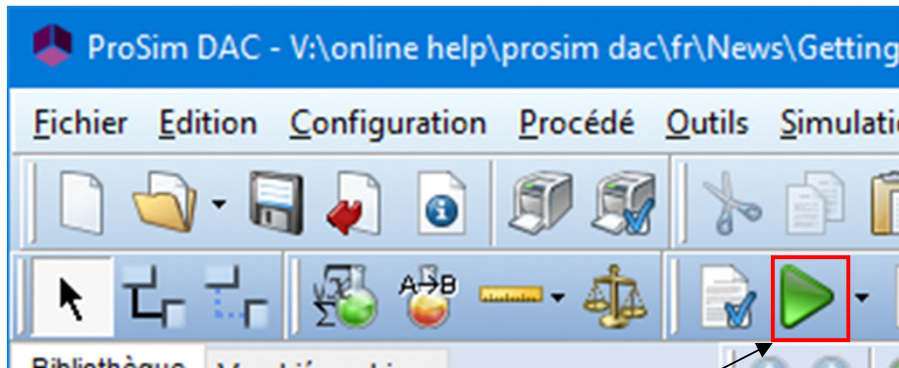
## E- Durée opératoire

- Définir la durée opératoire totale
  - Dans ProSim DAC le temps final et le « Delta » doivent être les mêmes.



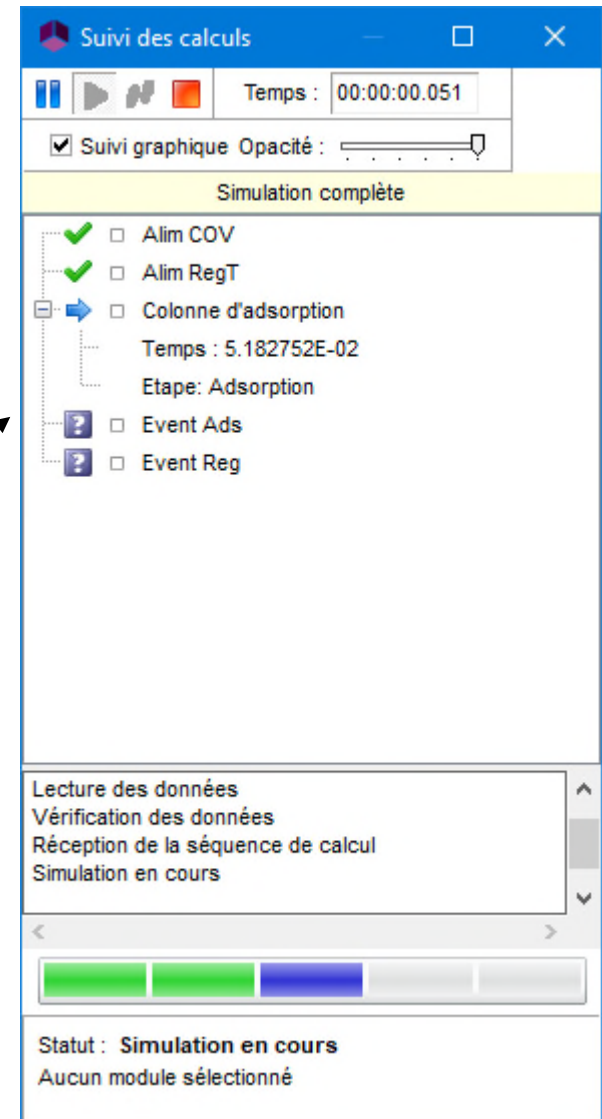


# Etape 4 : Lancez la simulation








Cliquez sur la flèche verte pour lancer la simulation.

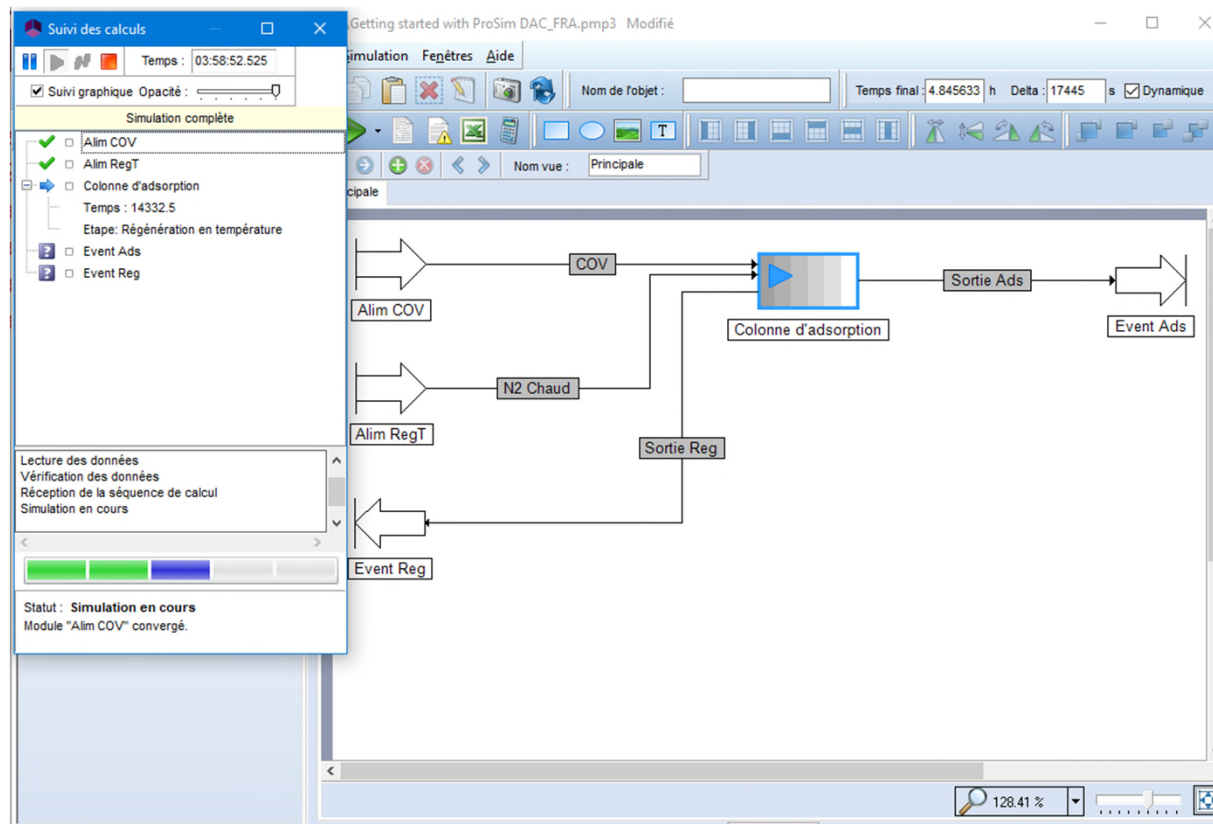
Quand la simulation démarre, la fenêtre *Suivi des calculs* apparaît.



# Etape 4 : Lancez la simulation

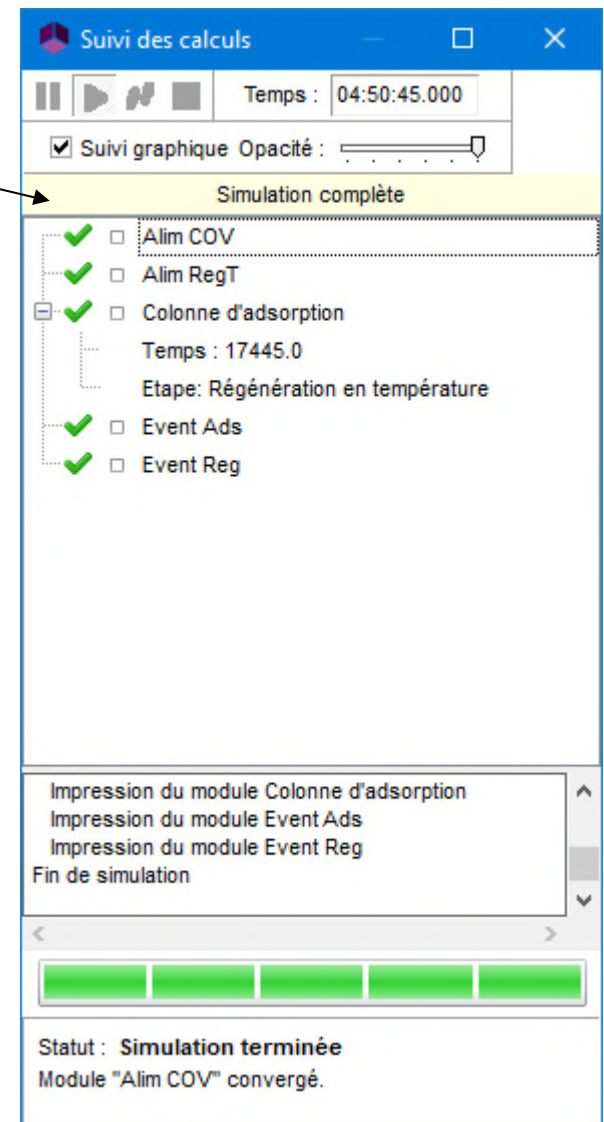
Au cours des calculs, différents symboles et indications apparaissent et disparaissent dans la fenêtre *Suivi des calculs* et dans la zone de dessin :

-  Indique que les calculs ont été correctement effectués
-  Indique que les calculs sont en cours
-  Indique que les calculs n'ont pas encore été effectués
-   Indique une erreur de convergence



# Etape 4 : Lancez la simulation

Quand tous les modules ont été correctement calculés, tous les symboles sont verts. La simulation s'est correctement déroulée.



Une fois que vous fermez la fenêtre, le rapport de simulation s'affiche automatiquement (cette option peut être modifiée dans les préférences du logiciel).

# Etape 5 : Résultats de simulation

- A. Rapport global
- B. Rapport et profils de la colonne d'adsorption
- C. Profils des courants de sortie



# Etape 5 : Résultats de simulation

## A- Rapport global

Le rapport HTML s'affiche automatiquement après chaque simulation, et fournit les informations suivantes :

- Propriétés des corps purs et des modèles thermodynamiques.
- Liste des modules calculés.
- Caractéristiques des courants du procédé.
- Résultat pour chaque module du procédé.
- Convergence et contraintes.

Des hyperliens vous permettent d'accéder directement à des informations précises sur la configuration initiale, les modules, les séquences de calculs et les résultats.

**Rapport de Simulation ProSimPlus** (V:\online help\prosim dac\fr\News\Getting started with ProSim DAC\_FRA.htm)

Table des matières  
Table des courants  
Table des modules  
Fichier de données  
Séquence de calcul 1  
Modèles thermodynamiques  
Matrice de procédé  
Séquence de calcul 2  
Rapport de simulation  
Courants  
Modules  
Alim COV  
Alim RegT  
**Colonne d'adsorption**  
Event Ads  
Event Reg  
Modules (groupés)  
Temps écoulés

MODULE : Colonne d'adsorption  
TYPE : Colonne d'adsorption  
DESCRIPTION :

COURANTS ENTRANTS :  
[COV](#)  
[N2 Chaud](#)

COURANTS SORTANTS :  
[Sortie Ads](#)  
[Sortie Reg](#)

CALCULATOR THERMODYNAMIQUE : [\[New calculator\]](#)

-----  
**DONNEES D'ENTREE DE LA SIMULATION**  
-----

**ALIMENTATION(S)**

Alimentation en adsorbat : COV  
Alimentation pour la régénération en température : N2 Chaud  
Alimentation pour la régénération en pression : Non utilisée  
Alimentation pour le refroidissement : Non utilisée

**CARACTERISTIQUES GENERALES DE LA COLONNE**

Colonne a flux longitudinal  
Diamètre : 5.000000E-02 (M)  
Longueur : 0.275000 (M)  
Fonctionnement thermique  
Transfert par la paroi et quantités de chaleur données  
Température de la paroi : 22.00 (C)  
Pression de sortie : 1.00 (ATM)

**CARACTERISTIQUES DU SOLIDE ADSORBANT**

Degré de vide du lit : 0.370000  
Diamètre des particules : 4.000000E-03 (M)  
Densité du solide adsorbant : 750.00 (KG/M3)  
Chaleur spécifique du solide : 0.25 (CAL/G/K)

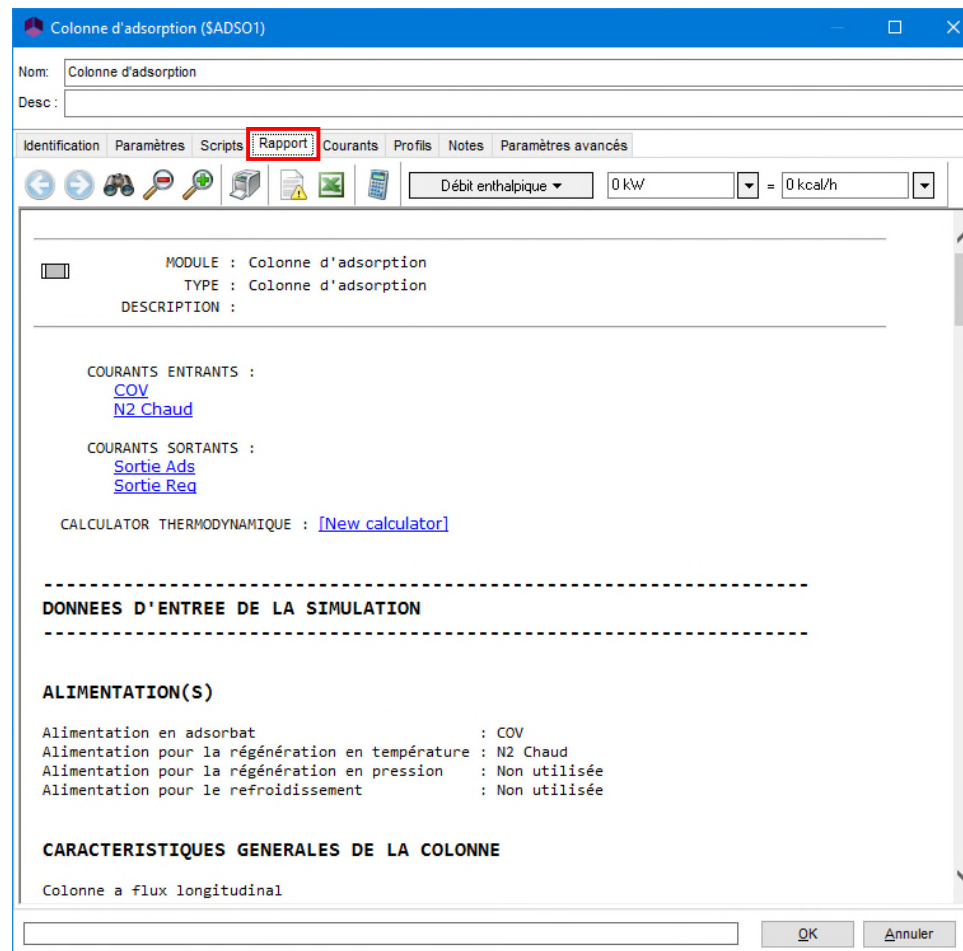


Tous les rapports sont créés dans le même répertoire que votre projet.

# Etape 5 : Résultats de simulation

## B- Rapport et profils de la colonne d'adsorption

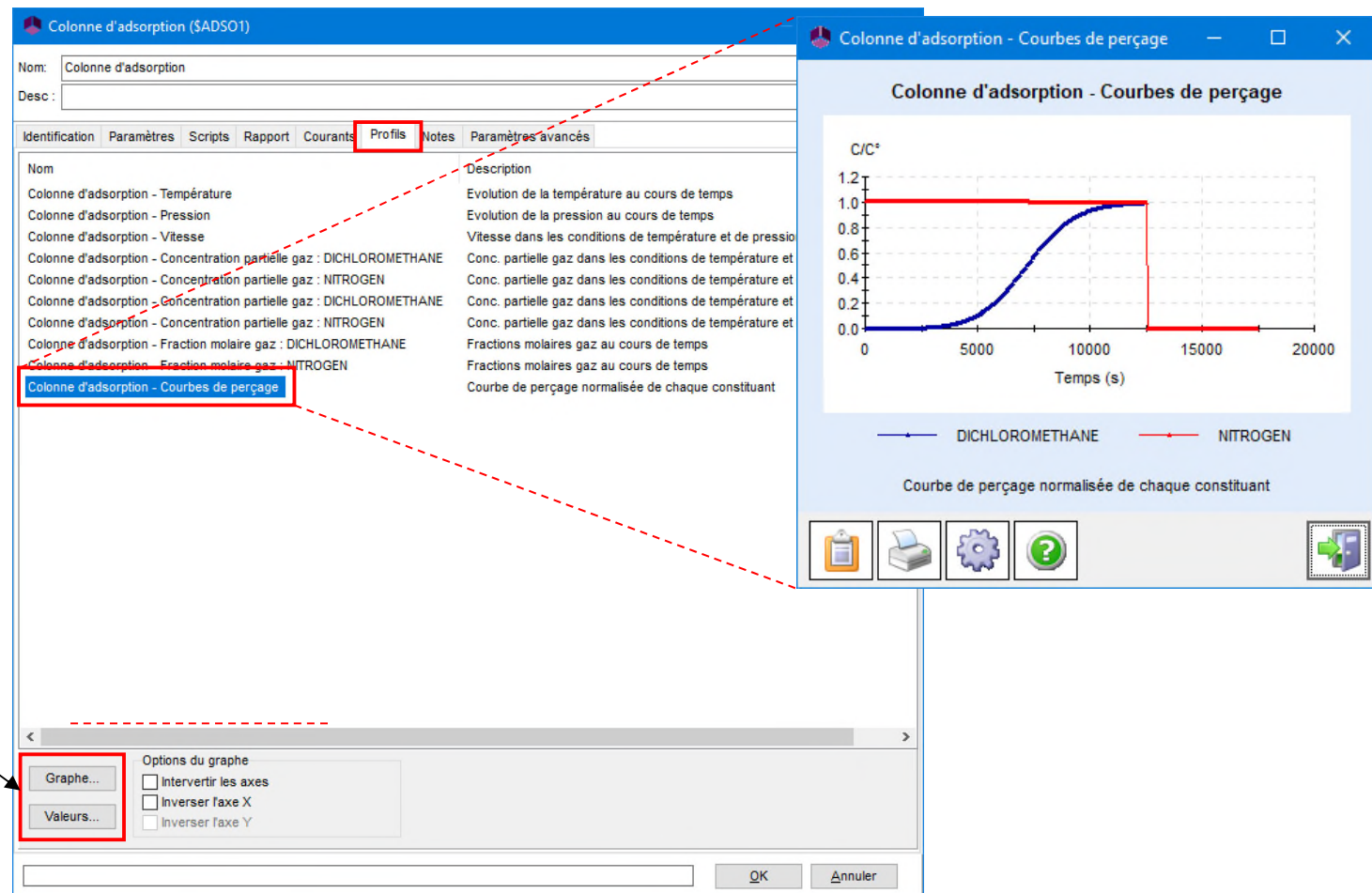
- Les résultats tabulés sont aussi disponibles dans l'onglet « Rapport » du module colonne d'adsorption
  - Quantités adsorbées, quantités régénérées, etc.



# Etape 5 : Résultats de simulation

## B- Rapport et profils de la colonne d'adsorption

- Des profils sont disponibles dans l'onglet « Rapport » du module colonne d'adsorption
  - Température, concentrations, courbes de perçage, etc.



Trace le graphe  
ou affiche les  
valeurs

# Etape 5 : Résultats de simulation

## C- Profils des courants de sortie

- Des profils sont disponibles dans les courants de sortie de la colonne
  1. Double-cliquez sur un courant de sortie pour ouvrir sa fenêtre d'édition
  2. Allez dans l'onglet « Paramètres »
  3. Cliquez sur le bouton « Résultats tabulés »

**Courant matière (SMSTR1)**

Nom: Sortie Ads

Desc:

Id:

**2** Paramètres Rapport Notes Paramètres avancés

Copier Coller **3** Résultats tabulés...

☐ Courant initialisé

Débits et fractions Température et Pression

Spécification pour le débit Débits massiques partiels

Débits massiques partiels

Unité kg/h

#	Constituants	Débits massiques
1	DICHLOROMETHANE	0
2	NITROGEN	0

Liaison:

OK Annuler

ProSim DAC\_FRA.pmp3 Modifié

Nom de l'objet:

Temps final: 4.845633 h Delta: 17445 s ☒ Dynamique

Nom vue: Principale

COV

N2 Chaud

RegT

Sortie Reg

Colonne d'adsorption

**1** Sortie Ads

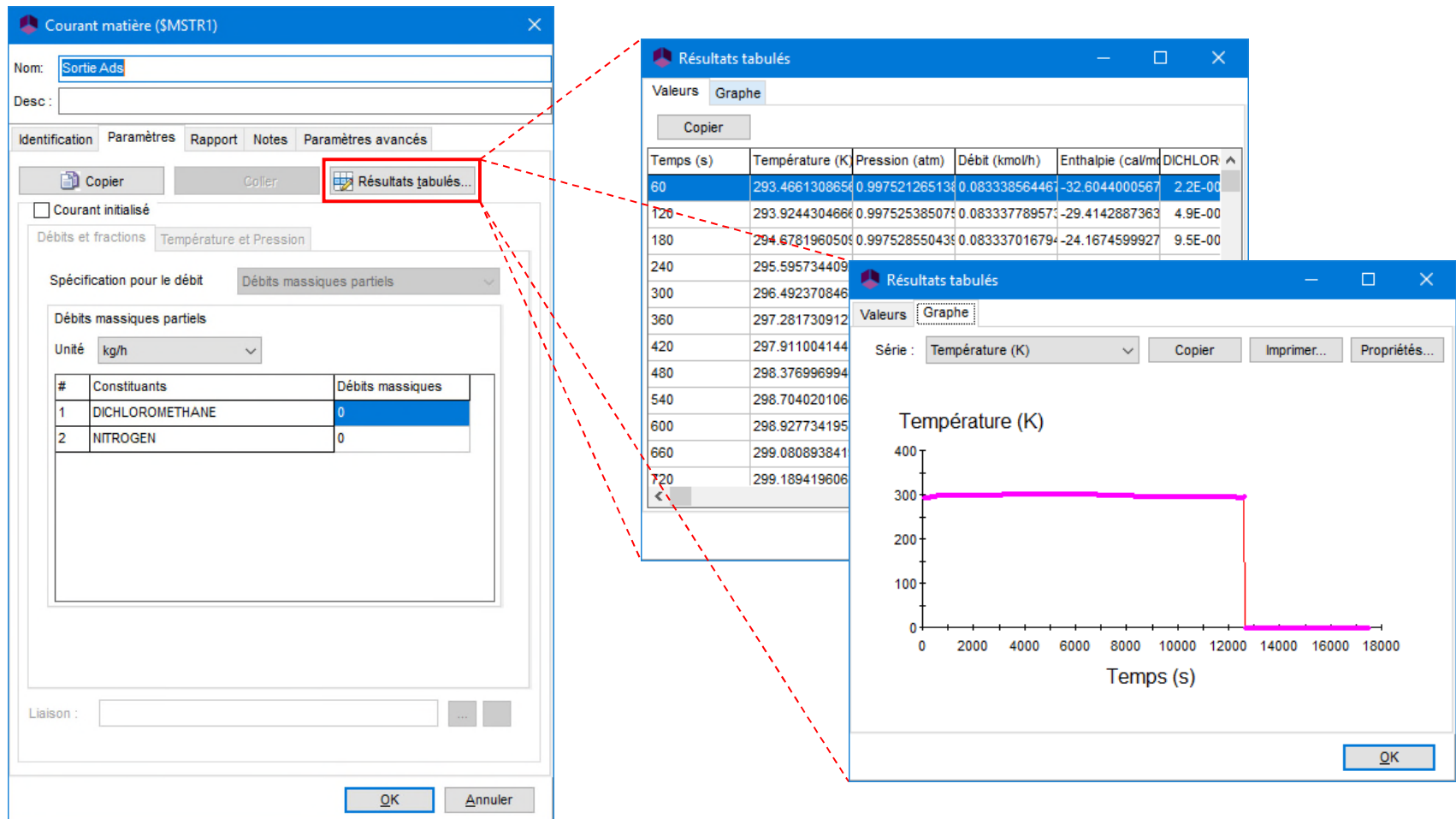
Event Ads



# Etape 5 : Résultats de simulation

## C- Profils des courants de sortie

- Des profils sont disponibles dans les courants de sortie de la colonne
  - Profils de température, compositions, etc. en sortie de la colonne



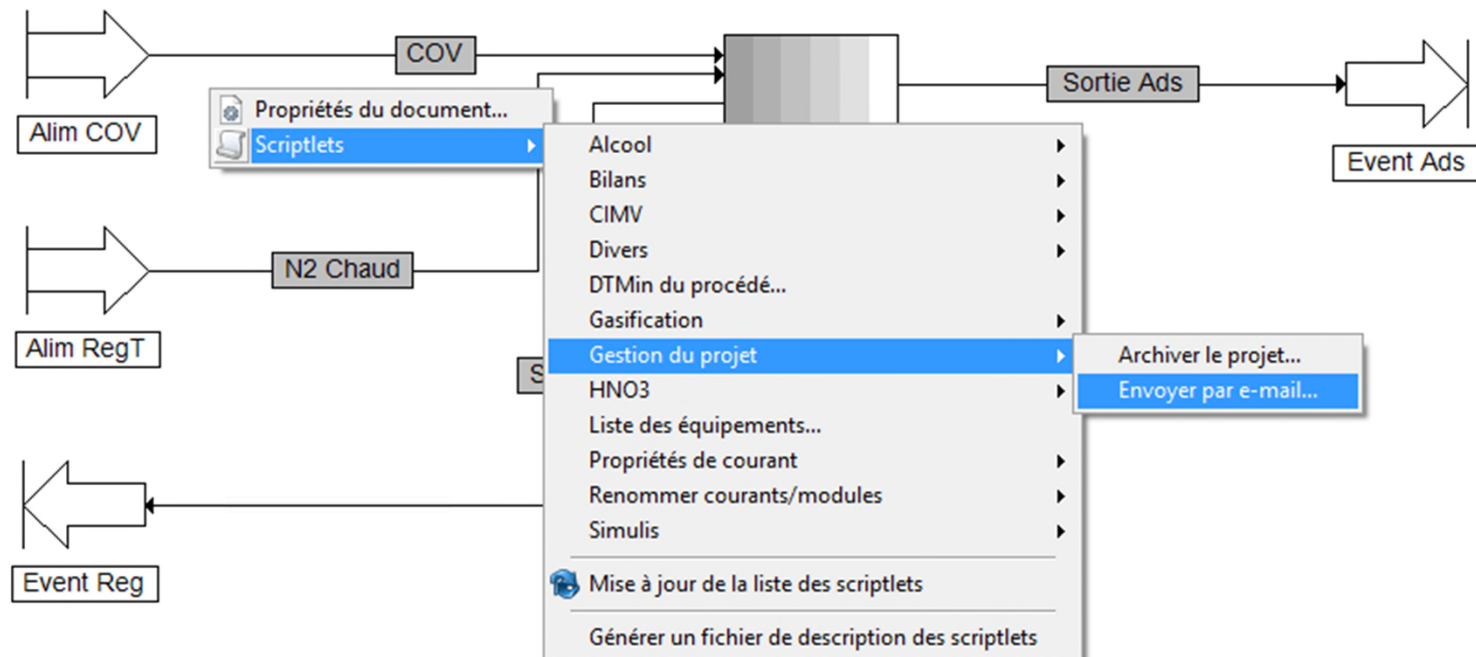


# Etape 6 : Partagez la simulation

Pour envoyer par mail les résultats de la simulation, faites un clic-droit sur le flowsheet et sélectionnez l'option *Scriptlet/Gestion du projet/Envoyer par e-mail...*

Un .zip sera automatiquement créé, comprenant entre autre :

- ✓ Le fichier « .pmp3 » (fichier ProSim DAC)
- ✓ Le fichier « .htm » (rapport des résultats)
- ✓ ...





### ProSim SA

51, rue Ampère  
Immeuble Stratège A  
F-31670 Labège  
France

☎: +33 (0) 5 62 88 24 30



Software & Services In Process Simulation

[www.prosim.net](http://www.prosim.net)  
[info@prosim.net](mailto:info@prosim.net)



### ProSim, Inc.

325 Chestnut Street, Suite 800  
Philadelphia, PA 19106  
U.S.A.

☎: +1 215 600 3759