

# 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.

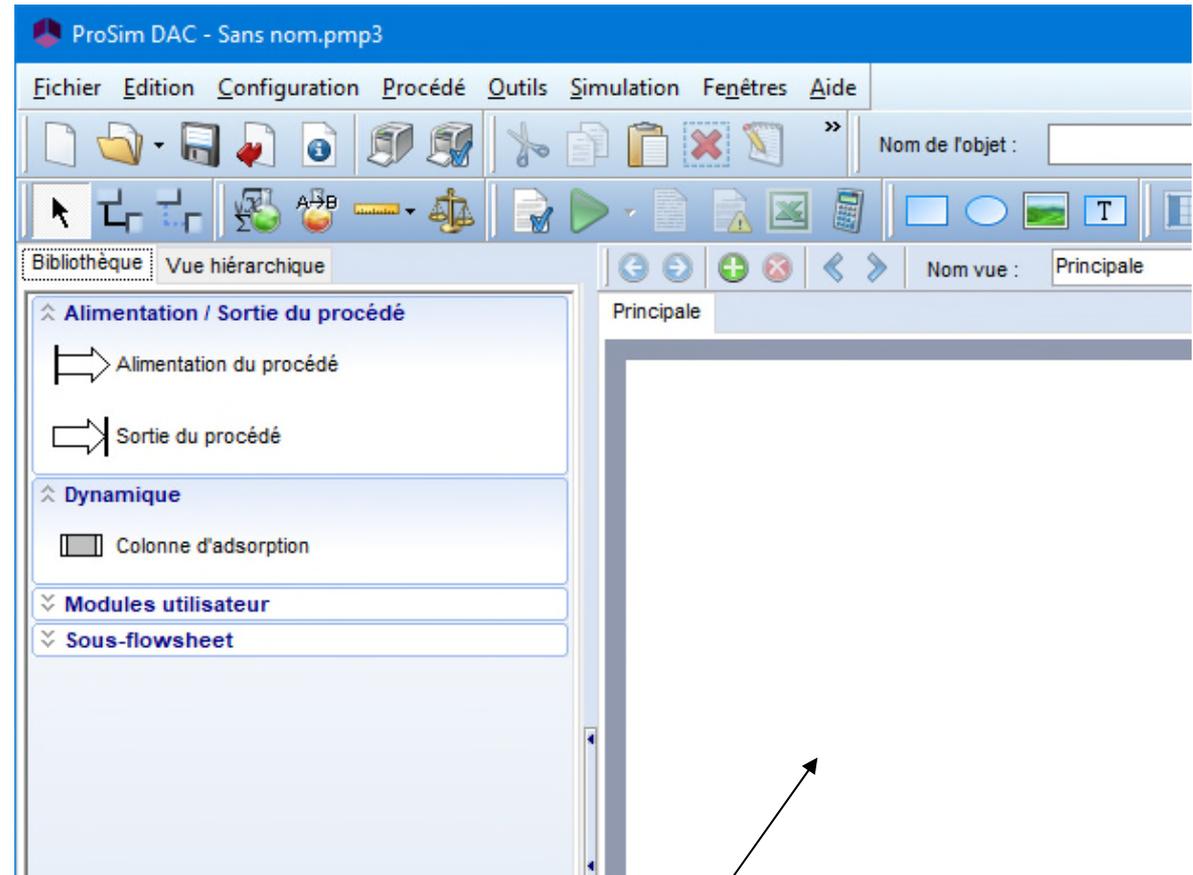
# Prérequis : Présentation de l'interface

Barre des menus

Barre d'outils

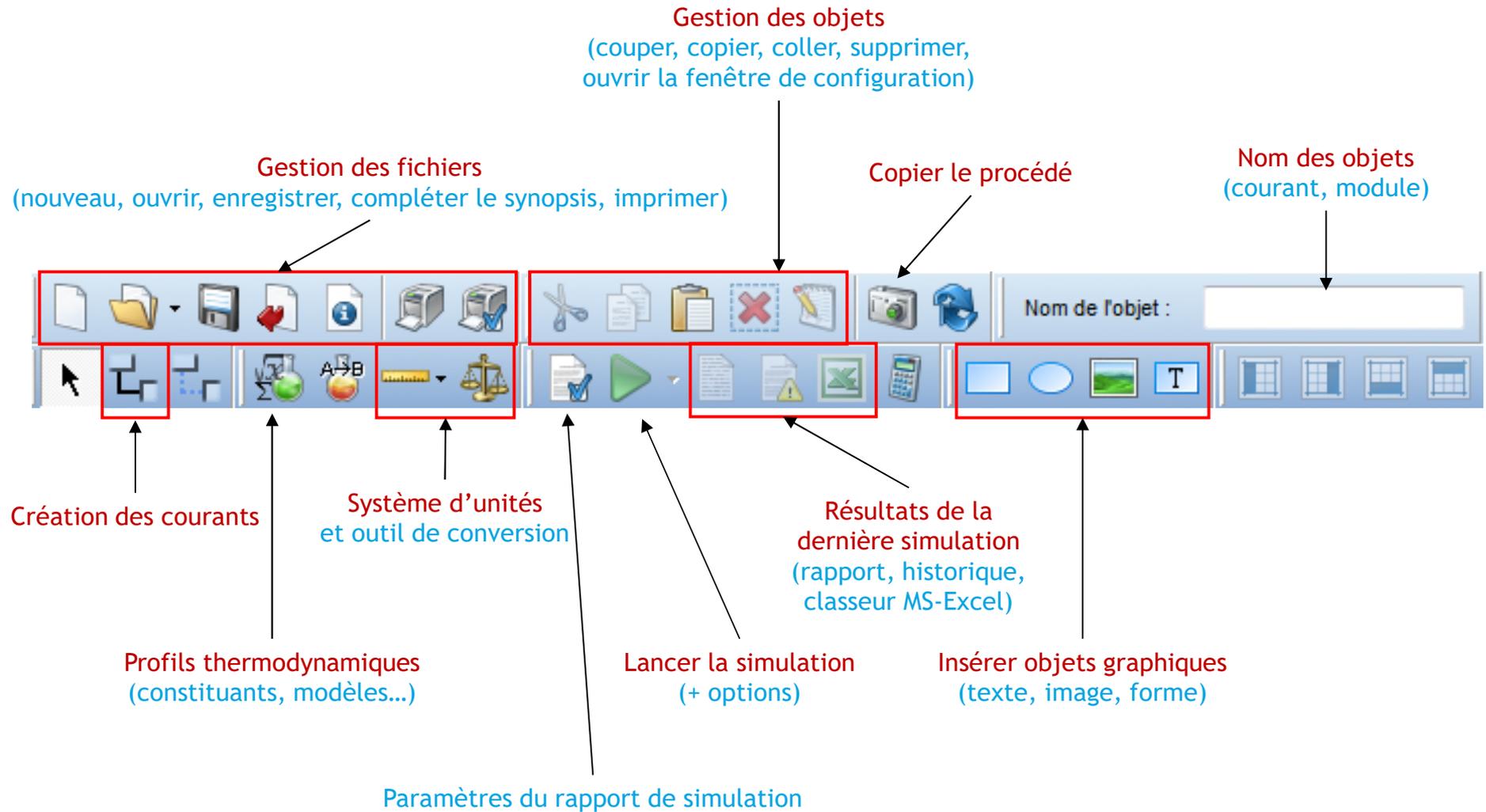
Liste des catégories

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



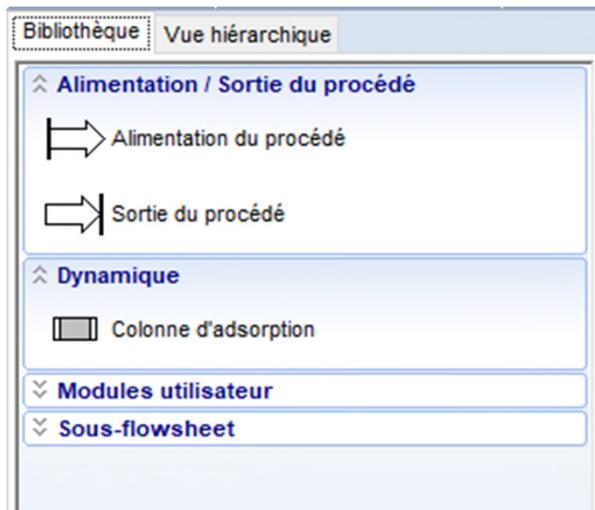
Durée totale de la simulation

Durée de la simulation pour un module donné

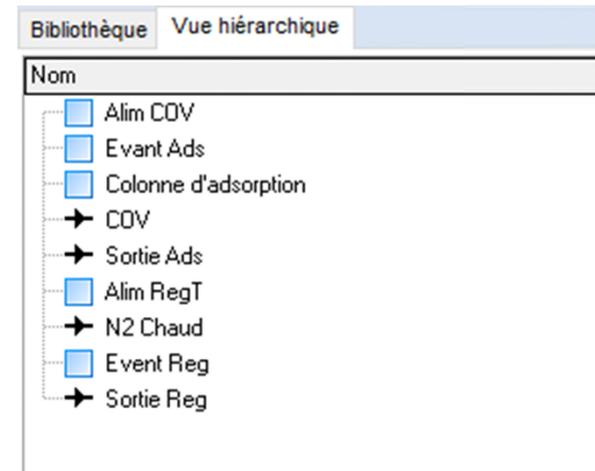
Cochez cette case pour lancer une simulation dynamique

# 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

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

**Editeur de calculators thermodynamiques**

Cette fenêtre permet de gérer une liste de calculators.

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

Commentaires :

OK Annuler

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.

Editeur de calculators thermodynamiques

Cette fenêtre permet de gérer une liste de calculators.

Défaut	Nom	Type
●	[Nouveau calculator]	Natif

Editeur de calculator thermodynamique

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

CONSTITUANTS | MODELE | PARAMETRES

Nom IUPAC	Nombre CAS
-----------	------------

CONSTITUANTS

FICHER

- Ouvrir...
- Enregistrer sous...
- Publier...

PACKAGE

EDITER

- Sélectionner les constituants...
- Ajouter un nouveau constituant
- Supprimer tous les constituants
- Editer ce constituant...
- Cloner ce constituant
- Supprimer la sélection

SERVICES

- Créer un pseudo-constituant...
- Propriétés dépendantes de l...
- Editeur tableau
- Comparer à l'original
- Comparer les constituants

ORDRE

- Déplacer ce constituant vers le haut
- Déplacer ce constituant vers le bas

Commentaires :

OK Annuler

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.

The screenshot shows the 'Résultats de recherche' window. On the left, the 'CRITÈRES' section has 'Recherche' selected. The search term 'dichloromethane' is entered in the input field. Under 'OPTIONS', the checkbox 'Effacer les résultats précédents' is checked. The 'RECHERCHER DANS' section shows a tree view of databases, with 'Standard 2017' selected. The central area displays search results for 'DICHLOROMETHANE' with columns for IUPAC name, chemical formula, number, molar mass, and boiling point. The right side shows 'Constituants sélectionnés' with 'DICHLOROMETHANE' listed.

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

Les résultats de recherche sont affichés dans la zone centrale.

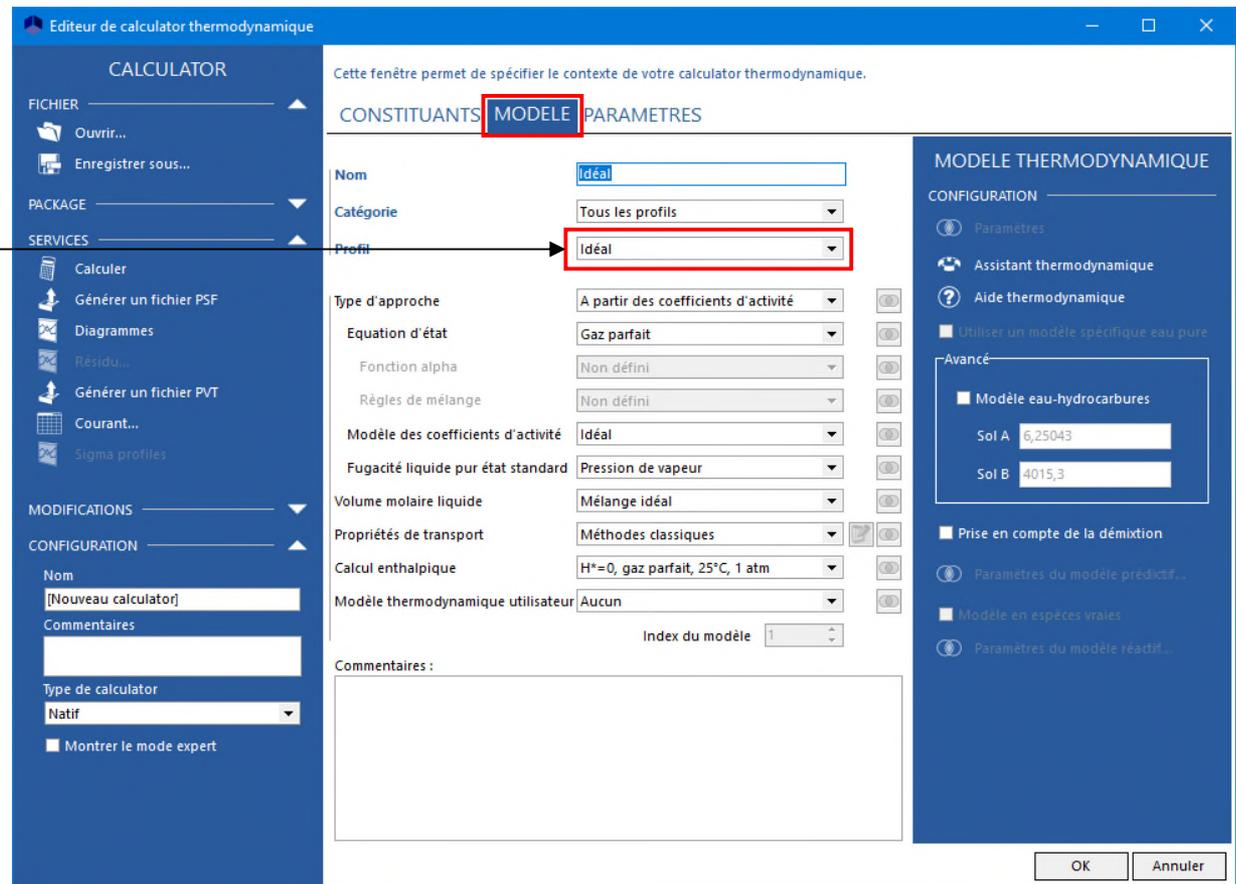
Double-cliquez sur le constituant voulu pour le sélectionner. La sélection sera affichée dans la zone de droite.

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 ».



# 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

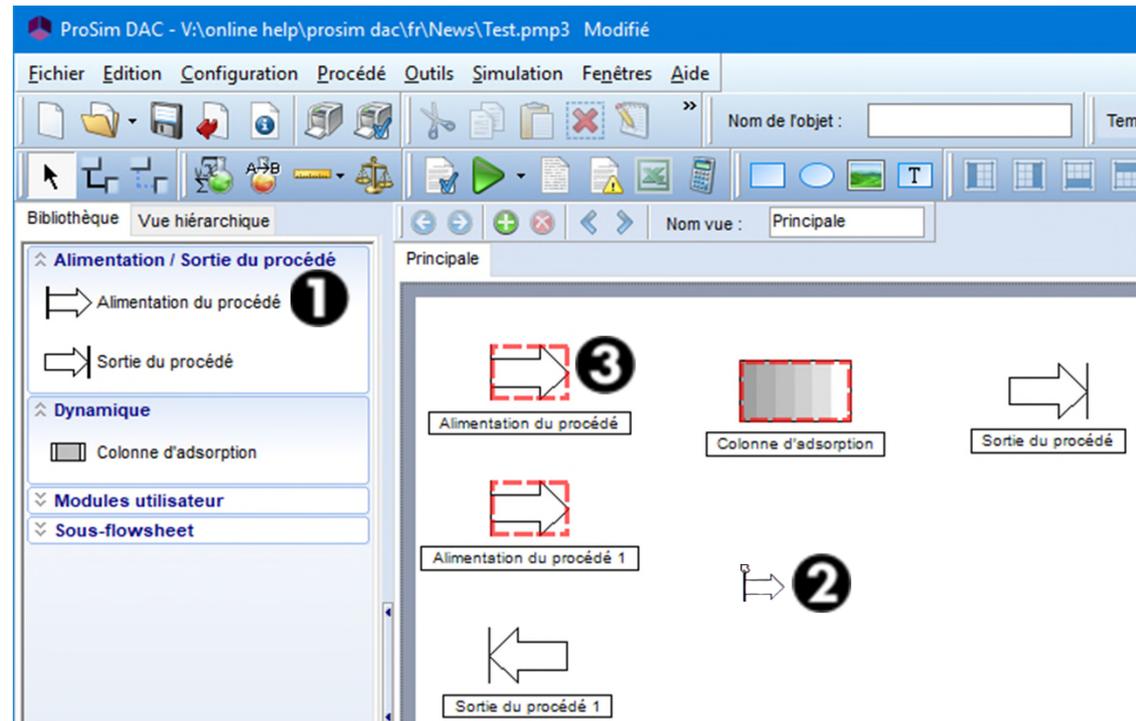
Deux alimentations du procédé, deux sorties du procédé et une colonne d'adsorption sont nécessaires pour cet exemple.

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.

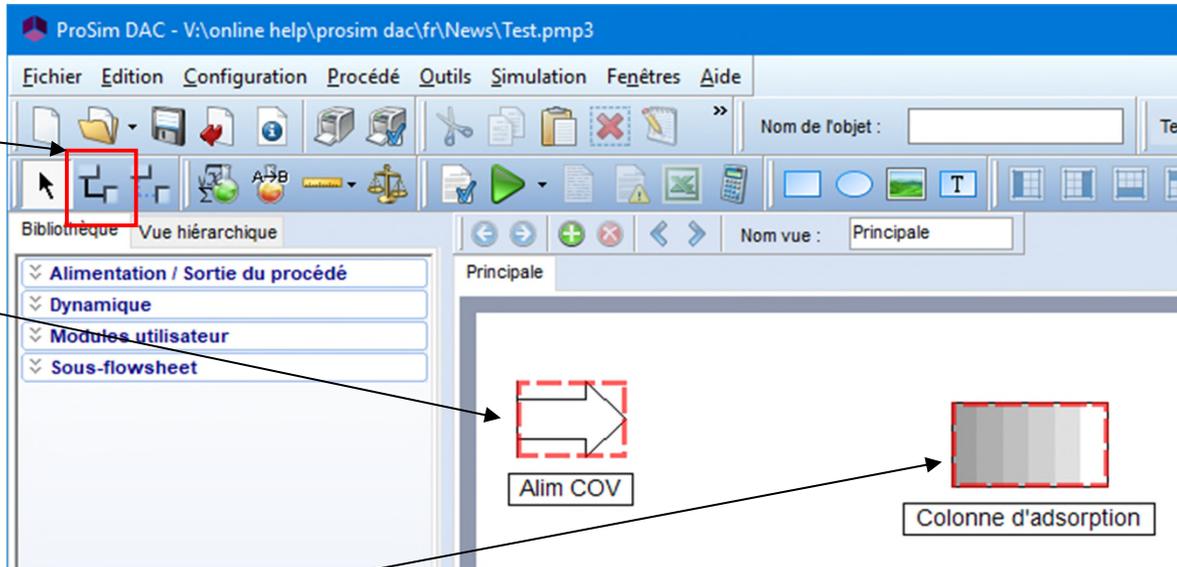


De nombreuses fonctionnalités vous permettent de modifier la taille, d'aligner, de procéder à des rotations, des repositionnements, des éléments sélectionnés sur la zone de dessin.

# 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

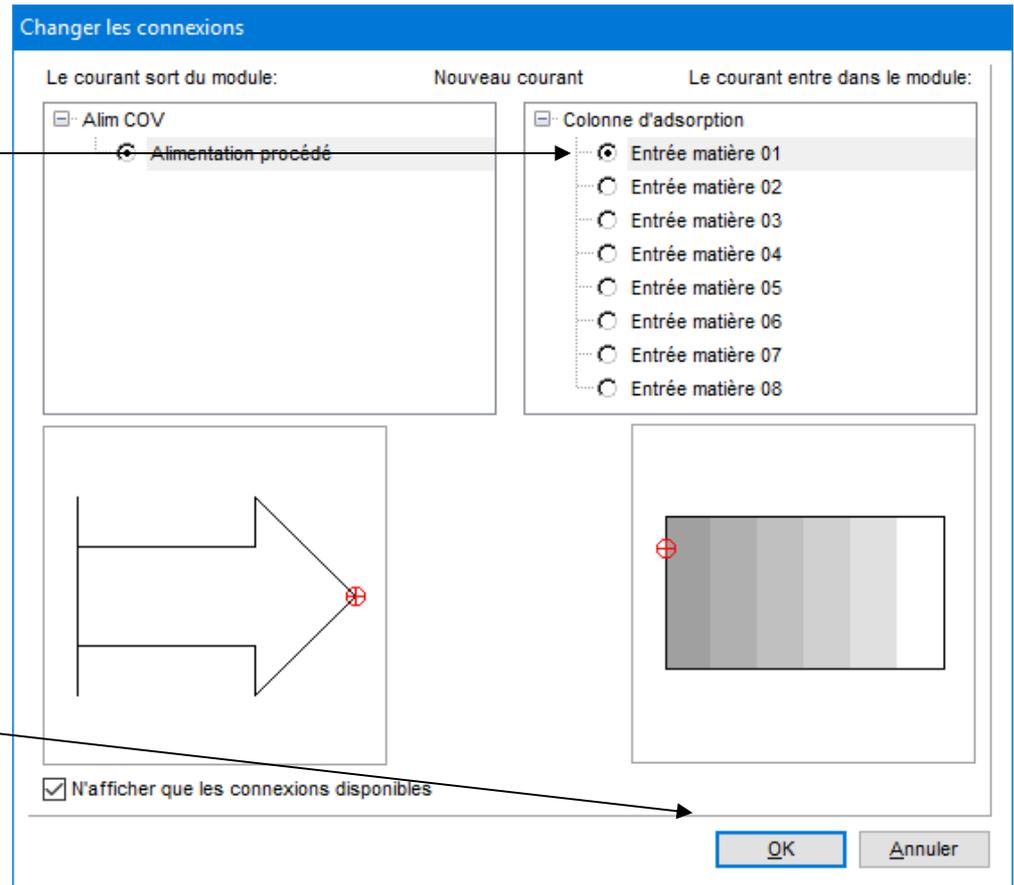
## B- Connecter les modules

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.

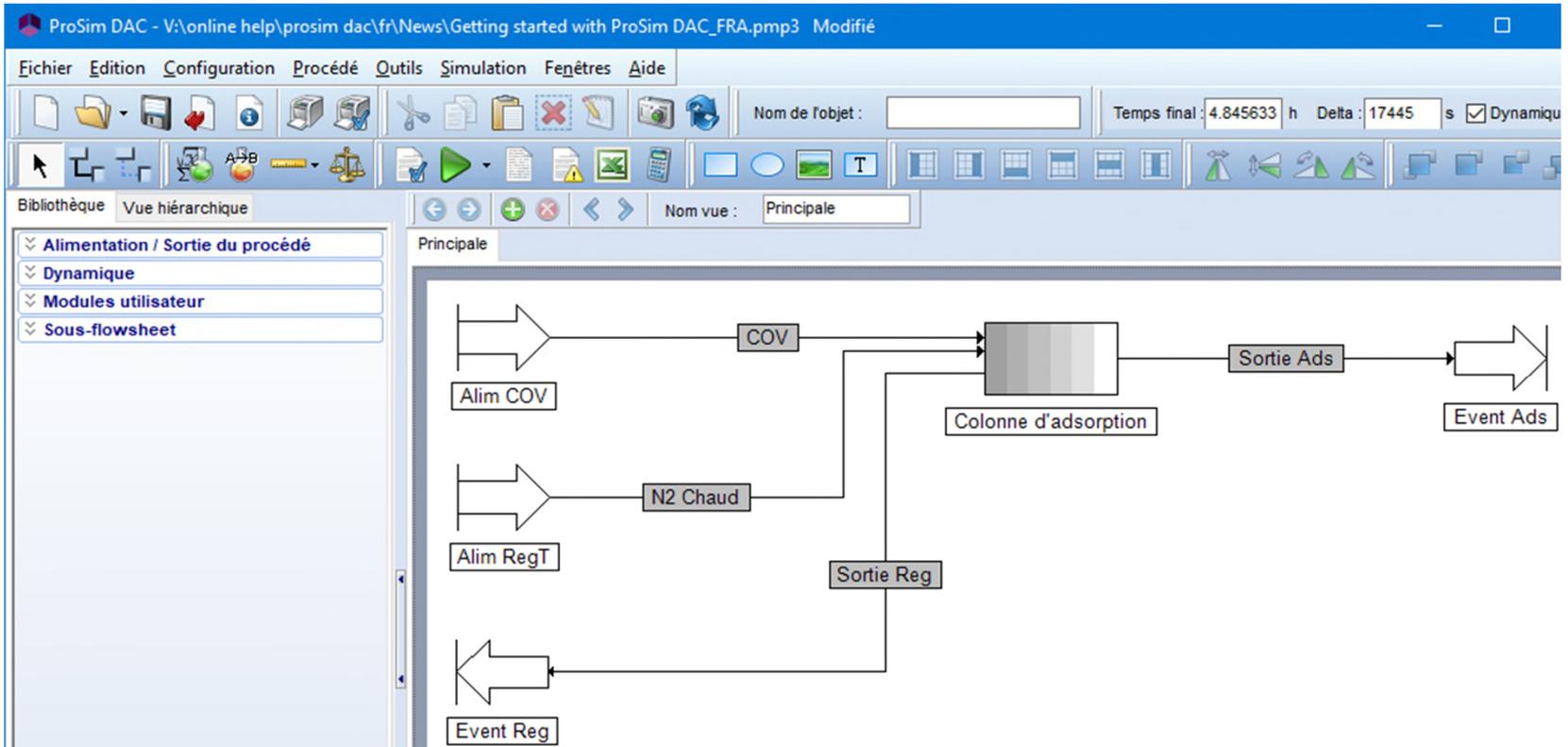
2. Cliquez sur *OK*

3. Répétez pour les différents courants matières



# Etape 3 : Créez le flowsheet

## B- Connecter les modules



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 tree view of the process flow. A context menu is open over the 'Alim COV' node, with the 'Editer...' option selected. The 'Paramètres' tab is active in the 'Entrée du procédé (\$ALIM)' dialog box. The dialog box contains the following information:

Entrée du procédé (\$ALIM)

Nom: Alim COV

Desc:

Paramètres Scripts Rapport Courants Notes Paramètr

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

#	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 Coler 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 Coler 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 (\$ALIM1)

Nom:

Desc:

Identification Paramètres Scripts Rapport Courants Notes Paramètr

Copier Coller  Données tabulées...

Débits et fractions Température et Pression

Spécification pour le débit

Fractions molaires		
#	Constituants	Fractions molaires
1	DICHLOROMETHANE	0
2	NITROGEN	1

Somme :  1 - somme :

Débit Total  Débit molaire

Débit molaire total

Liaison :  ...

OK Annuler

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 Coler 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 Coler 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
<p>Matière</p> <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.

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 : Colonne d'adsorption Temps final : 4.845633 h Delta : 17445 s

Bibliothèque Vue hiérarchique

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

Principale

Nom vue : Principale

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

Colonne d'adsorption (\$ADSO1)

Nom : Colonne d'adsorption

Desc :

Paramètres Scripts Rapport Courants Profils Notes Paramètres avancés

Caractéristiques Constituants Transfert Autres Adsorption / Régénération Bilan financier Impressions Paramètres

**Alimentations**

<input checked="" type="checkbox"/> Flux d'adsorbats	COV
<input checked="" type="checkbox"/> Flux pour la régénération en température	N2 Chaud
<input type="checkbox"/> Flux pour la régénération en pression	
<input type="checkbox"/> Flux pour le refroidissement	

**Sorties**

<input checked="" type="checkbox"/> Etapes d'adsorption	Sortie Ads
<input checked="" type="checkbox"/> Etapes de régénération	Sortie Reg

OK Annuler

# 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**

<input checked="" type="checkbox"/> Flux d'adsorbats	COV
<input checked="" type="checkbox"/> Flux pour la régénération en température	N2 Chaud
<input type="checkbox"/> Flux pour la régénération en pression	
<input type="checkbox"/> Flux pour le refroidissement	

**Sorties**

<input checked="" type="checkbox"/> Etapes d'adsorption	Sortie Ads
<input checked="" type="checkbox"/> 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

Colonne d'adsorption (SADS01)

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

Transfert thermique Q donnée et transfert à la paroi

Température de la paroi 22 °C

**Adsorbant** Charger...

Degré de vide du lit 0.37 m<sup>3</sup>/m<sup>3</sup>

Diamètre des particules 4 mm

Densité des particules 750 kg/m<sup>3</sup>

Chaleur spécifique du solide 1050 J/kg/K

Rapport surface/volume 1500 m<sup>2</sup>/m<sup>3</sup>

**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	NITR	

Colonne à flux longitudinal

Diamètre de la colonne (D) 5 cm

Longueur de la colonne (L) 27.5 cm

OK Annuler

# 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

Transfert thermique Q donnée et transfert à la paroi

Température de la paroi 22 °C

**Adsorbant** **Charger...**

Degré de vide du lit 0.37 m<sup>3</sup>/m<sup>3</sup>

Diamètre des particules 4 mm

Densité des particules 750 kg/m<sup>3</sup>

Chaleur spécifique du solide 1050 J/kg/K

Rapport surface/volume 1500 m<sup>2</sup>/m<sup>3</sup>

**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

Sommation 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 (\$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

**Caractéristiques**

DICHLOROMETHANE  
NITROGEN

**Enthalpie d'adsorption**

Enthalpie d'adsorption Fourni

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

**Isotherme d'adsorption**

Corrélation Langmuir

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

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 (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

**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<sup>-1</sup>)

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/m2/K

OK Annuler

# Etape 3 : Créez le flowsheet

## D- Colonne d'adsorption

- Onglet « Autres »
  - Sélectionner le modèle thermodynamique 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

**Vanne**

Présence d'une vanne en sortie

Etat au démarrage: Ouvrir

Pression à l'ouverture: 0 atm

Coefficient de l'équation: 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 (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

**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...

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 (\$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

**Adsorption et régénération**

Type de séquence: Adsorption + régénération en température

**Adsorption**

Paramètres...  
Evénements...

**Régénération en température**

Paramètres...  
Evénements...

**Fin de la simulation**

Evénements...

Diagramme de séquence:

```

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

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

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 configuration interface for an adsorption column simulation. The main window, titled "Colonne d'adsorption (\$ADS01)", has the "Adsorption / Régénération" tab selected. The process flow diagram shows the following steps: Adsorption (A) → EVA → Régénération en température (RT) → EVT. The "Événements d'adsorption" dialog box is open, showing the following configuration options:

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

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

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

Paramètres... Événements...

**Régénération en température**

Paramètres... Événements...

**Fin de la simulation**

Événements...

Flowsheet diagram showing the sequence: A (Adsorption) → EVA (Evénements de fin d'adsorption) → RT (Régénération en température) → EVT (Evénements de fin de régénération en température).

OK Annuler

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)' software interface. The main window shows a process flow diagram with units A, EVA, RT, and EVT. A red dashed line highlights the 'Evénements...' button for the 'Régénération en température' unit. An inset window titled 'Evénements de la régénération en température' shows a list of events with 'Durée' checked and set to 4845 s.

**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... **Evénements...**

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

**Evénements de la régénération en température**

**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				

OK Annuler

# 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 (\$ADS01)' software interface. The main window shows the 'Adsorption / Régénération' tab, which includes a process flow diagram with units A, EVA, RT, and EVT. A red dashed line connects the 'Evénements...' button in the 'Fin de la simulation' section to the 'Evénements de fin de simulation' dialog box.

The 'Evénements de fin de simulation' dialog box contains the following settings:

Événement	État	Valeur	Unité	Position	Unité
Temps de fin de simulation	<input checked="" type="checkbox"/>				
Nombre de cycles	<input type="checkbox"/>	0			
Quantité totale produite	<input type="checkbox"/>	0	kmol	0	m
Température maximale	<input type="checkbox"/>	0	K	0	m
Pression maximale	<input type="checkbox"/>	0	atm	0	m
Quantité totale traitée	<input type="checkbox"/>	0	kmol		
Constituant à suivre					

Buttons: OK, Annuler

# 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)

The screenshot displays the 'Colonne d'adsorption (SADSO1)' software window. The 'Impressions' tab is selected and highlighted with a red box. The interface includes a title bar, a 'Nom' field (Colonne d'adsorption), and a 'Desc' field. Below these are several tabs: Identification, Paramètres, Scripts, Rapport, Courants, Profils, Notes, Paramètres avancés, Courants, Caractéristiques, Constituants, Transfert, Autres, Adsorption / Régénération, Bilan financier, Impressions, and Paramètres. The 'Impressions' tab contains the following settings:

- 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 inertes
  - Seuil: 1E-6 kmol

At the bottom of the window, there are 'OK' and 'Annuler' buttons.

# Etape 3 : Créez le flowsheet

## D- Colonne d'adsorption

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

Colonne d'adsorption (SADS01)

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>)

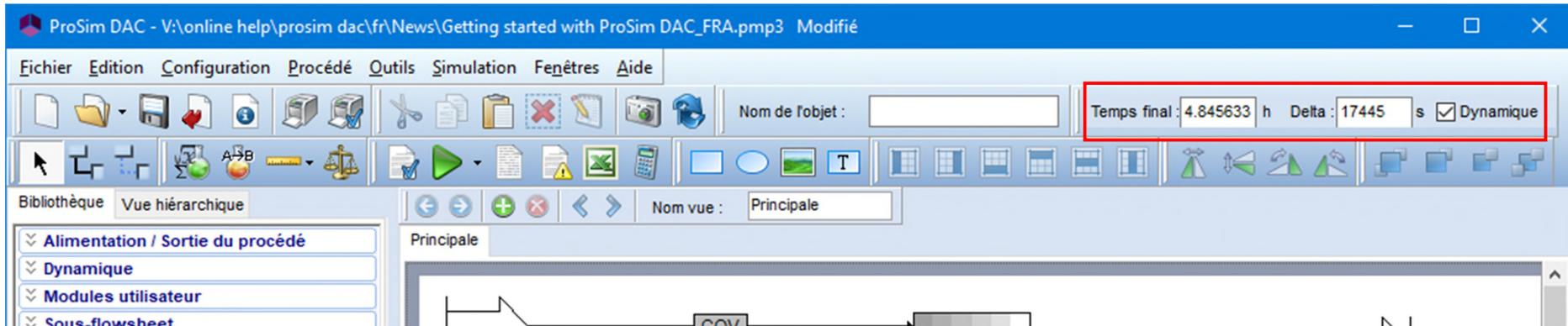
1	DICHLOROMETHANE	0.006
2	NITROGEN	0

OK Annuler

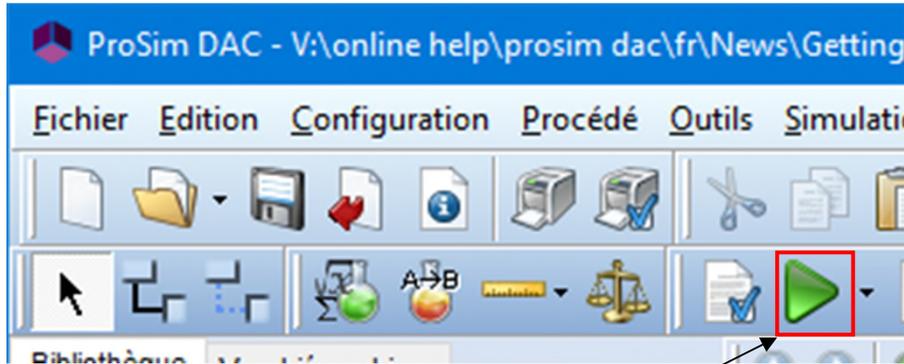
Nombre de cellules de discrétisation longitudinale

# 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.

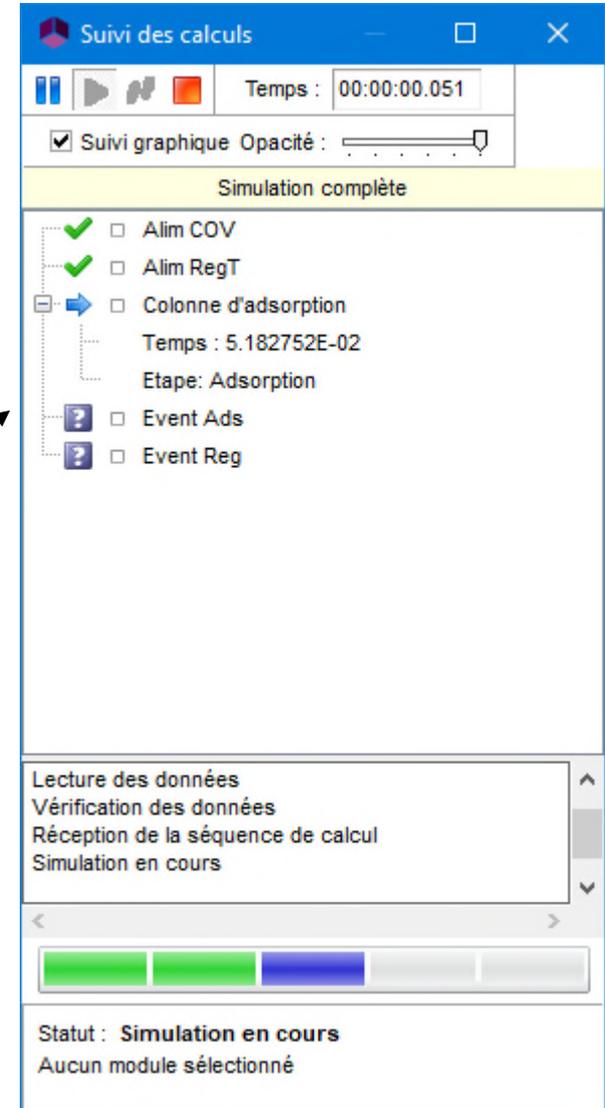


# Etape 4 : Lancez la simulation



Cliquez sur la flèche verte pour lancer la simulation.

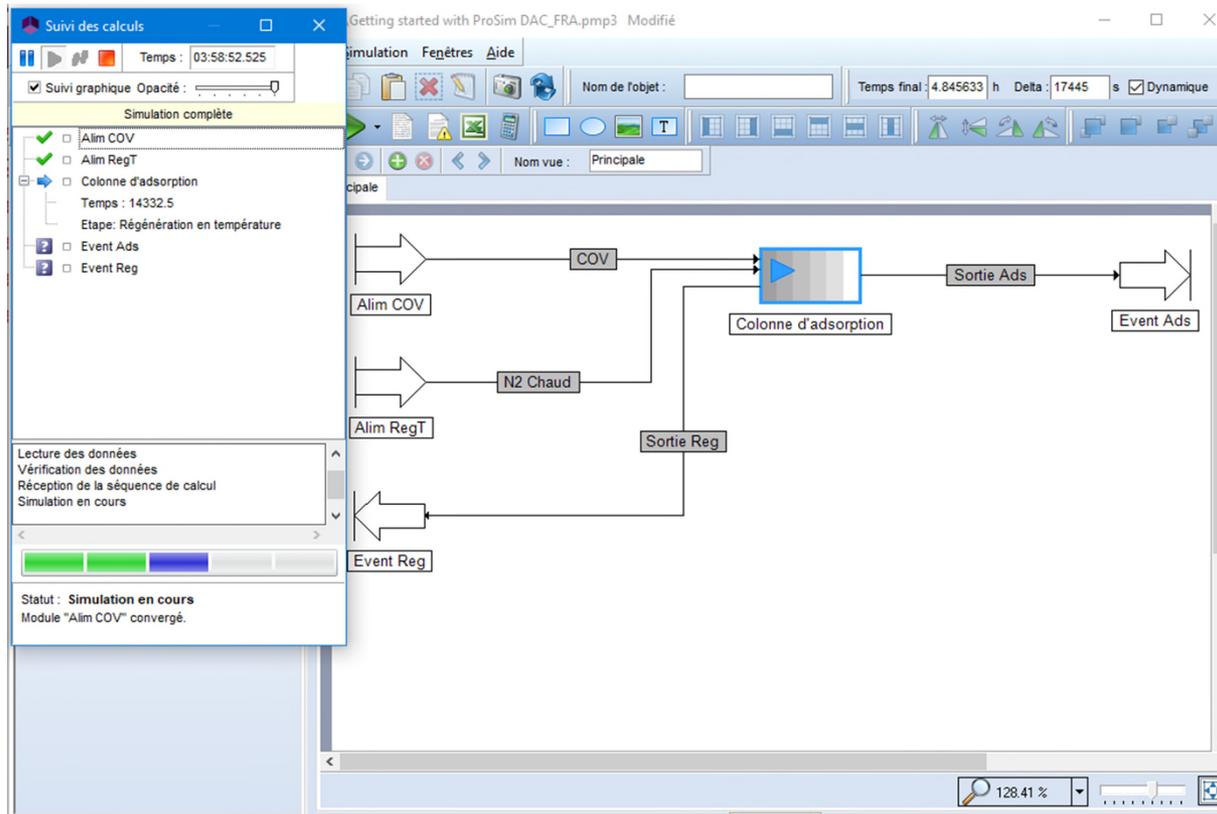
Quand la simulation démarre, la fenêtre *Suivi des calculs* apparaît.



# Etape 4 : Lancez la simulation

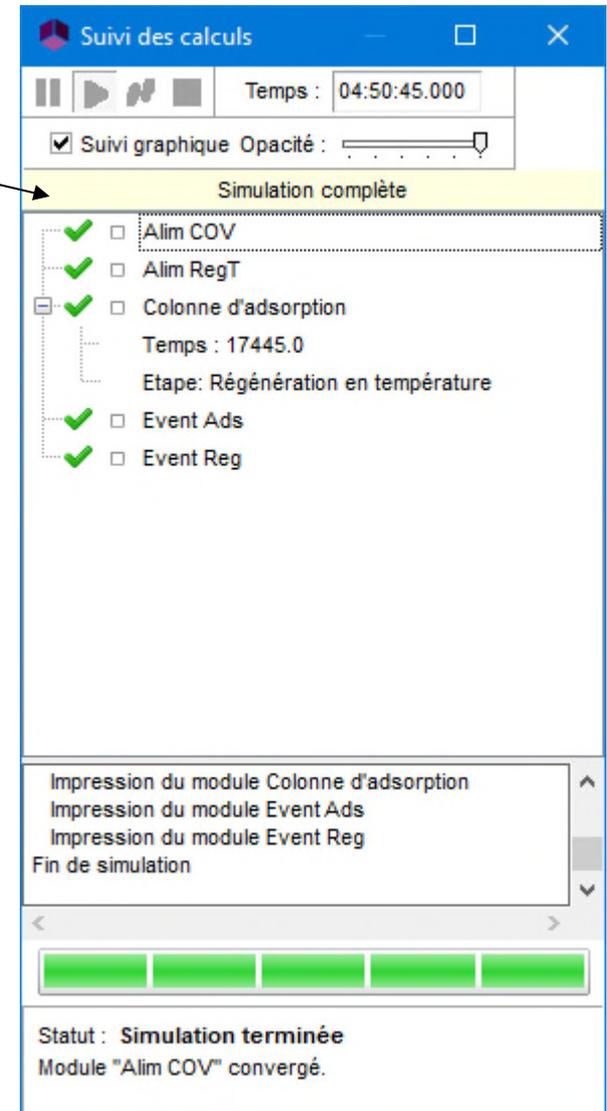
Au cours des calculs, différents symboles et indications apparaissent et disparaissent dans la fenêtre *Suivi des calculs* et dans la zone de dessin :

-  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)

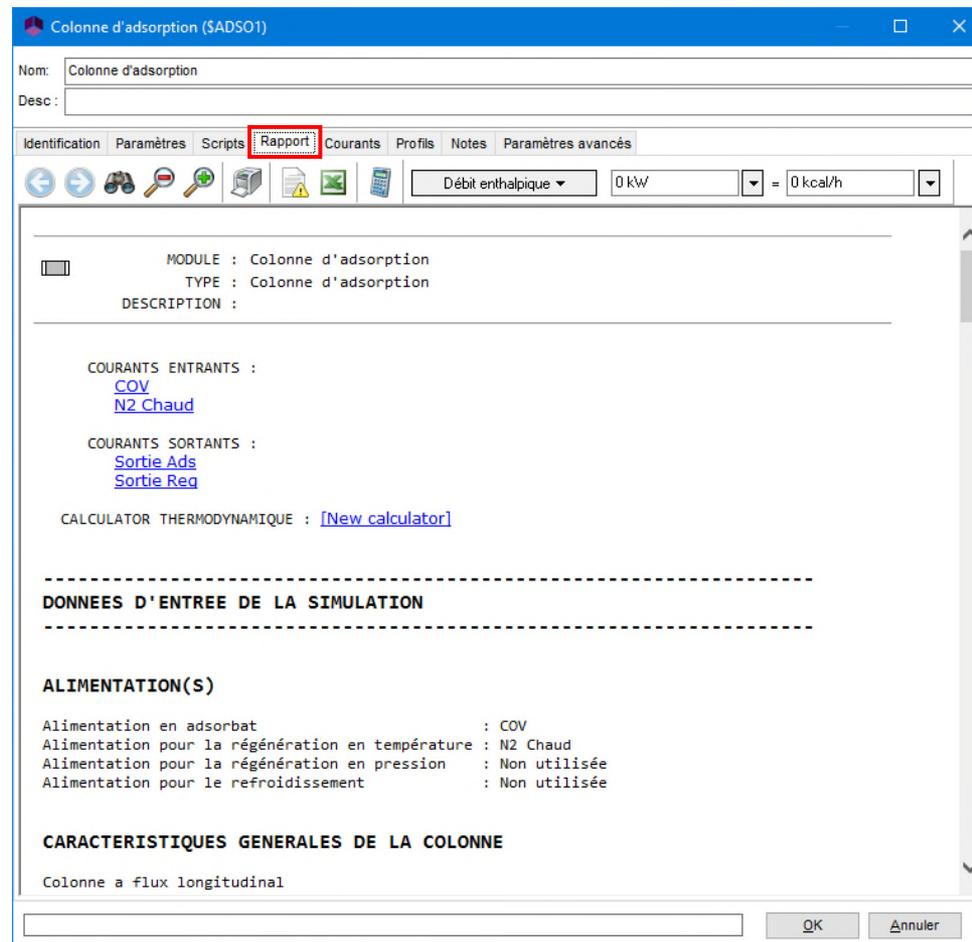


Tous les rapports sont créés dans le même répertoire que votre projet.

# 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.

The screenshot shows the 'Colonnes d'adsorption (SADS01)' software interface. The 'Profils' tab is active, displaying a list of simulation profiles. The profile 'Colonnes d'adsorption - Courbes de perçage' is highlighted with a red box. A secondary window titled 'Colonnes d'adsorption - Courbes de perçage' displays a graph of normalized breakthrough curves. The y-axis is labeled 'C/C°' and ranges from 0.0 to 1.2. The x-axis is labeled 'Temps (s)' and ranges from 0 to 20000. Two curves are shown: a blue curve for 'DICHLOROMETHANE' and a red curve for 'NITROGEN'. The blue curve shows a sigmoidal breakthrough starting around 5000s and reaching 1.0 around 10000s. The red curve remains at 1.0 until approximately 12000s, then drops sharply to 0.0. Below the graph, there are icons for clipboard, printer, settings, help, and a green arrow icon. At the bottom of the main window, there are buttons for 'Graphe...' and 'Valeurs...' which are highlighted with a red box. An arrow points from the text 'Trace le graphe ou affiche les valeurs' to these buttons.

Options du graphe

- Intervenir les axes
- Inverser l'axe X
- Inverser l'axe Y

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 »

The screenshot displays the 'Courant matière (SMSTR1)' dialog box in the ProSim software. The 'Paramètres' tab is selected, and the 'Résultats tabulés...' button is highlighted with a red box and a circled '3'. The 'Sortie Ads' stream is highlighted in the table below.

#	Constituants	Débites massiques
1	DICHLOROMETHANE	0
2	NITROGEN	0

The process flow diagram shows a 'Colonne d'adsorption' unit with an output stream 'Sortie Ads' (marked with a circled '1'). Other streams include 'COV', 'N2 Chaud', 'Sortie Reg', and '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

The main window 'Courant matière (\$MSTR1)' shows the following configuration:

- Nom: **Sortie Ads**
- Desc:
- Identification | Paramètres | Rapport | Notes | Paramètres avancés
- Copier | Colier | **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

The 'Résultats tabulés' window (top) shows the following data table:

Temps (s)	Température (K)	Pression (atm)	Débit (kmol/h)	Enthalpie (cal/m)	DICHLOR ^
60	293.4661308656	0.99752126513	0.083338564467	-32.6044000567	2.2E-00
120	293.9244304666	0.99752538507	0.08333778957	-29.4142887363	4.9E-00
180	294.6781960509	0.99752855043	0.083337016794	-24.1674599927	9.5E-00
240	295.595734409				
300	296.492370846				
360	297.281730912				
420	297.911004144				
480	298.376996994				
540	298.704020106				
600	298.927734195				
660	299.080893841				
720	299.189419606				

The 'Résultats tabulés' window (bottom) shows a graph of Temperature (K) versus Temps (s). The temperature is constant at approximately 300 K until 1200 seconds, then drops sharply to 0 K.

Température (K)

Temps (s)

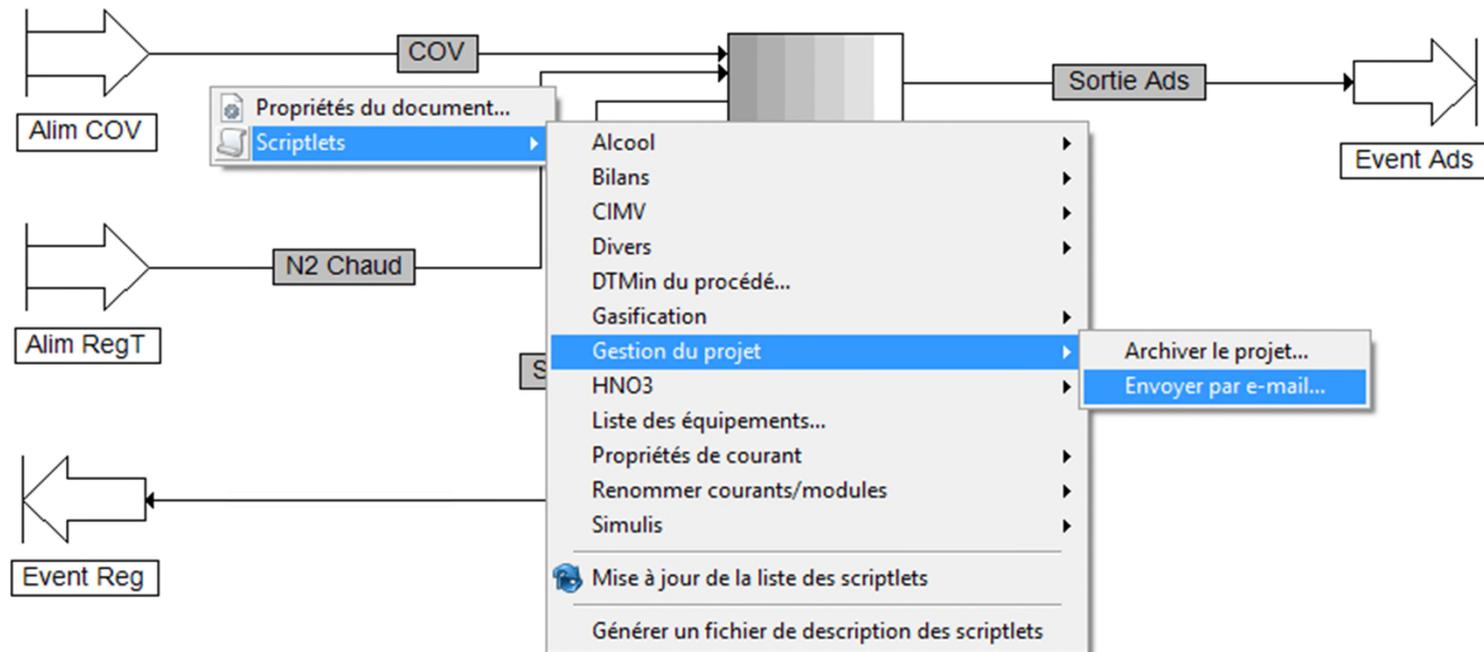
OK

# 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



# ProSim

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