

Démarrer avec Simulis® Thermodynamics

Cas 7 : Tracer des courbes de résidu

Software & Services In Process Simulation

We guide You to efficiency



ProSim

Introduction

Ce document présente les différentes étapes à suivre pour tracer des courbes de résidu avec Simulis Thermodynamics.

Les étapes sont les suivantes:

Etape 1 : Définissez le système à étudier

Etape 2 : Tracez le diagramme ternaire

Etape 3 : Tracez les courbes de résidu

Cet exemple utilise un système ternaire comprenant de l'Acétone, du Méthanol et du Méthyl Ethyl Cétone (Methyl Ethyl Ketone / MEK).

Avant d'aborder ce chapitre il est fortement recommandé de consulter le document « *Démarrer avec Simulis Thermodynamics, Cas 1* » qui couvre notamment les procédures de sélection de constituants et la définition du système thermodynamique.

A propos des courbes de résidu.....

L'analyse des réseaux de *courbes de résidu* est une technique pouvant par exemple être utilisée pour l'étude des tiers corps (appelés aussi entraîneurs) qui permettent la distillation de deux constituants en cassant leur azéotrope.

Le choix d'un entraîneur détermine la séquence de distillation. Cette sélection est donc une étape critique dans la conception d'un procédé de distillation azéotropique.

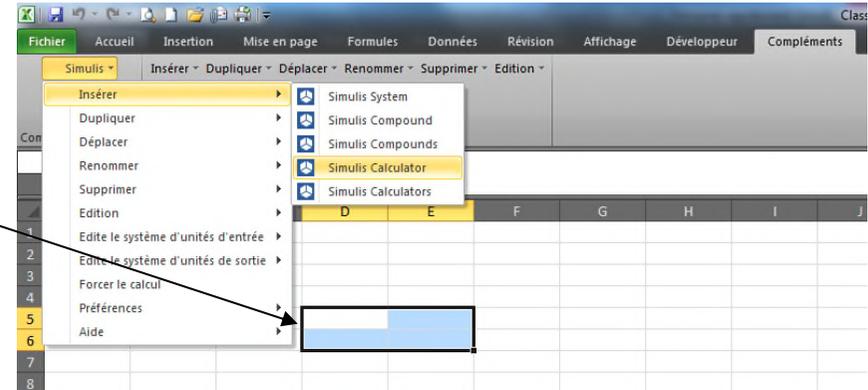
La *courbe de résidu* est construite en traçant l'évolution dans le temps de la composition du résidu liquide en équilibre avec la vapeur pendant une simple distillation batch (distillation de Rayleigh), en partant de la composition initiale du bouilleur. La trajectoire des compositions liquides en partant de la composition de la charge initiale est appelée *courbe de résidu*.

Etape 1 : Définissez le système à étudier

ACCÉDEZ À L'ÉDITEUR DE CALCULATOR THERMODYNAMIQUE :

- Si vous utilisez Simulis Thermodynamics dans Excel :

Créez l'objet « Calculator » dans votre feuille Excel, puis cliquez sur « Edition »



- Si vous utilisez Simulis Thermodynamics dans un logiciel de la suite ProSim (ProSimPlus, BatchReactor, BatchColumn etc...) :

Cliquez sur l'icône permettant d'accéder à Simulis Thermodynamics:

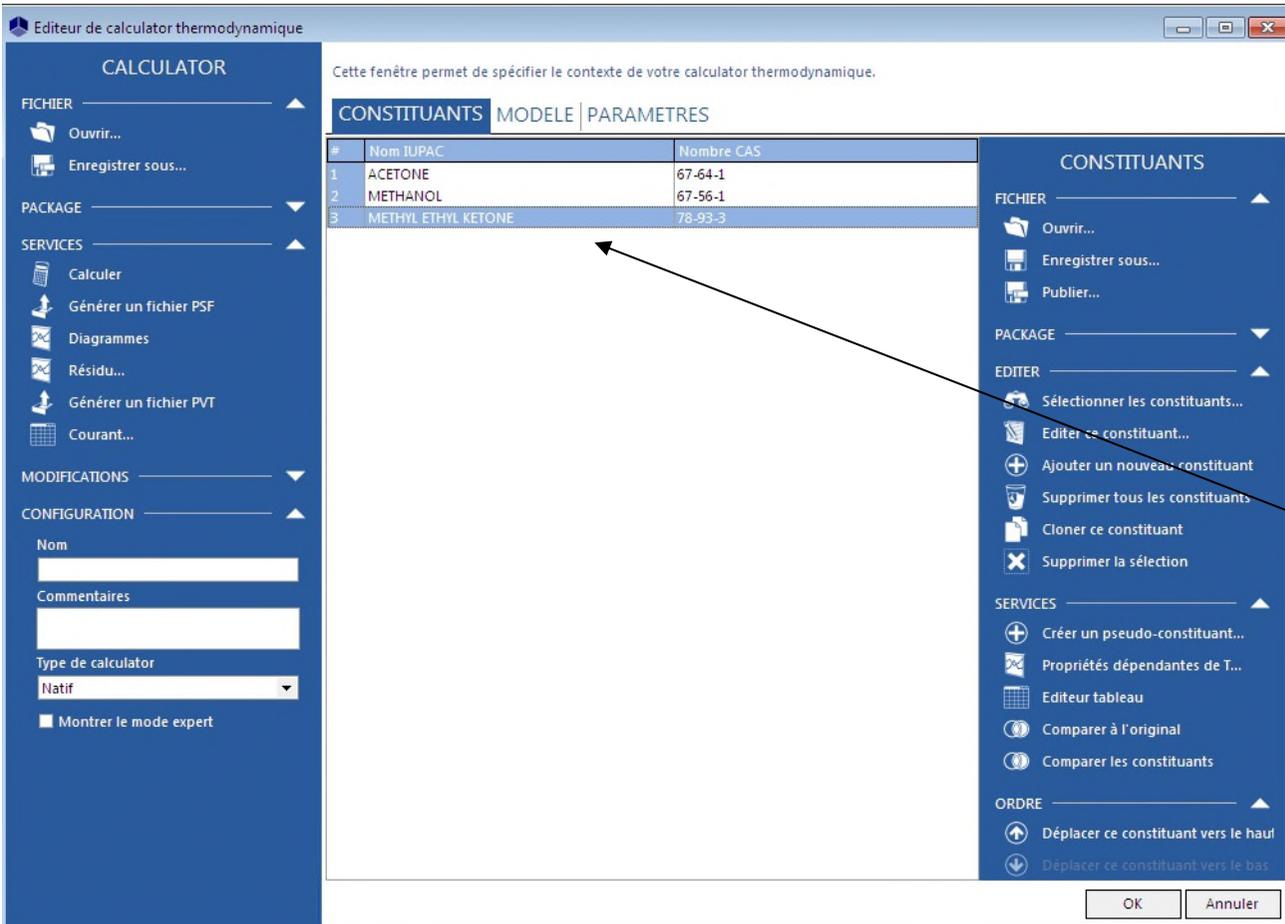


ou



Simulis Thermodynamics est un « composant logiciel », il peut donc être intégré dans différents environnements : logiciels ProSim, Excel, Matlab, ou autres...

Etape 1 : Définissez le système a étudier



Importez l'acétone, le méthanol et le méthyl éthyl cétone depuis la base de données disponible dans Simulis Thermodynamics (cliquez sur « *Sélectionner les constituants* »).



Consultez le document « *Démarrer avec Simulis Thermodynamics, Cas 1* » pour plus de détails sur cette opération.

Etape 1 : Définissez le système a étudier

Cliquez sur l'onglet "Modèle" puis sélectionnez le profil NRTL.

Editeur de calculator thermodynamique

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

CONSTITUANTS **MODELE** BINAIRES | PARAMETRES

Nom: NRTL

Catégorie: Tous les profils

Profil: NRTL

Type d'approche: A partir des coefficients d'activité

Equation d'état: Gaz parfait

Fonction alpha: Non défini

Règles de mélange: Non défini

Modèle des coefficients d'activité: NRTL

Fugacité liquide pur état standard: Pression de vapeur

Volume molaire liquide: Mélange idéal

Propriétés de transport: Méthodes classiques

Calcul enthalpique: $H^*=0$, gaz parfait, 25°C, 1 atm

Modèle thermodynamique utilisateur: Aucun

Index du modèle: 1

Commentaires :

MODELE THERMODYNAMIQUE

DOCUMENTATION

- Assistant thermodynamique
- Aide thermodynamique

PARAMETRES ADDITIONNELS

INFORMATIONS SUR LE MODELE

- Paramètres du modèle réactif...
- Paramètres du modèle prédictif...
- Paramètres de modèle polymère...

EAU-HYDROCARBURE

EAU PURE

OK Annuler



Consultez le document « Démarrer avec Simulis Thermodynamics, Cas 1 » pour plus de détails sur cette opération.

Etape 1 : Définissez le système à étudier

Editeur de calculator thermodynamique

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

CONSTITUANTS | MODELE | **BINAIRES** | PARAMETRES

Ces paramètres correspondent aux valeurs générales et sont utilisées si l'utilisateur n'a pas fourni de paramètres spécifiques (boutons à droite des options du profil thermodynamique)

Affichage : Grille Matrice

Formulation : $g_{ij} - g_{ij} = C_{ij0} + C_{ijT}(T - 273.15)$, $a_{ij} = a_{ij0} + a_{ijT}(T - 273.15)$

Constituant	Constituant	Cij0	Cji0	aij0	CijT
ACETONE	METHANOL	184,701	222,645	0,3084	0
ACETONE	METHYL ETHYL KET	0	0	0	0
METHANOL	METHYL ETHYL KET	307,427	217,91	0,3003	0

Unité : cal/mole

les paramètres seront ignorés

chargement automatique

OK Annuler

Cliquez sur l'onglet « *Binaires* » qui apparaît lorsque vous sélectionnez le modèle NRTL. Les paramètres d'interaction binaire (PIB) disponibles dans la base de données Standard ont été automatiquement chargés.



Consultez le document « *Démarrer avec Simulis Thermodynamics, Cas 1* » pour plus de détails sur cette opération.

Etape 2 : Tracez le diagramme ternaire

Cliquez sur « *Résidu* » pour accéder au service de calcul des courbes de résidu.

Editeur de calculator thermodynamique

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

CONSTITUANTS | MODELE | BINAIRES | PARAMETRES

#	Nom IUPAC	Nombre CAS
1	ACETONE	67-64-1
2	METHANOL	67-56-1
3	METHYL ETHYL KETONE	78-93-3

Commentaires :

OK Annuler

CONSTITUANTS

FICHER

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

PACKAGE

- Ouvrir le gestionnaire de package...
- Importer un package...
- Construire un package...
- Sélectionner un package CAPE-OPEN

SERVICES

- Calculer
- Générer un fichier PSF
- Diagrammes
- Résidu...
- Générer un fichier PVT
- Courant...
- Sigma profiles

MODIFICATIONS

CONFIGURATION

Nom

Commentaires

Type de calculator

Natif

Montrer le mode expert

SÉLECTIONNER LES CONSTITUANTS...

EDITER

- Editer ce constituant...
- Ajouter un nouveau constituant
- Supprimer tous les constituants
- Cloner ce constituant
- Mettre à jour les constituants
- Supprimer la sélection

SERVICES

- Créer un pseudo-constituant...
- Propriétés dépendantes de T...
- Editeur tableau
- Comparer à l'original
- Comparer les constituants

ORDRE

Déplacer ce constituant vers le haut



Ce service est disponible uniquement lorsque trois composants sont sélectionnés.

Etape 2 : Tracez le diagramme ternaire

Entrez la pression d'étude qui est de 1 atm (valeur par défaut).

Changez l'unité de température, de Kelvin à Celsius.

Cliquez sur "Azéotropes" afin d'identifier les potentiels azéotropes du mélange.

Cette fenêtre vous aide à déterminer les azéotropes et à tracer les courbes de résidus.

Azéotropes | Isovolatilités | Equilibres liquide-liquide | Courbes de résidu | Diagramme ternaire

Compositions de calculs (Molaire)

ACETONE	METHANOL	METHYL ETHYL KETONE
0,06667	0,06667	0,86666
0,06667	0,86666	0,06667
0,86666	0,06667	0,06667

Ajouter
Supprimer
Monter
Descendre

Azéotropes

Pur ?	Nom	Binaire	Ternaire	Système	Températu...	ACETONE	METHANOL	METHYL E...

Les compositions de calcul sont initialisées automatiquement, il n'est donc pas obligatoire de les fournir.

Etape 2 : Tracez le diagramme ternaire

Un tableau est généré et indique les températures d'ébullition des corps purs, ainsi que des azéotropes binaires et ternaires.

Residue curve...

COURBES DE RÉSIDU

DONNEES
Pression 1 atm

RÉSULTATS
Fractions Molaire

CALCULS
Azéotropes
Frontières
Isovolatilités
Equilibres liquide-liquide
Courbes de résidu

OPTIONS
Paramètres numériques
Style des courbes
Exporter vers MS Excel
Sketch...

Cette fenêtre vous aide à déterminer les azéotropes et à tracer les courbes de résidus.

Azéotropes | Frontières | Isovolatilités | Equilibres liquide-liquide | Courbes de résidu | Diagramme ternaire

Compositions de calculs (Molaire)

ACETONE	METHANOL	METHYL ETHYL KETONE
0,06667	0,06667	0,86666
0,06667	0,86666	0,06667
0,86666	0,06667	0,06667

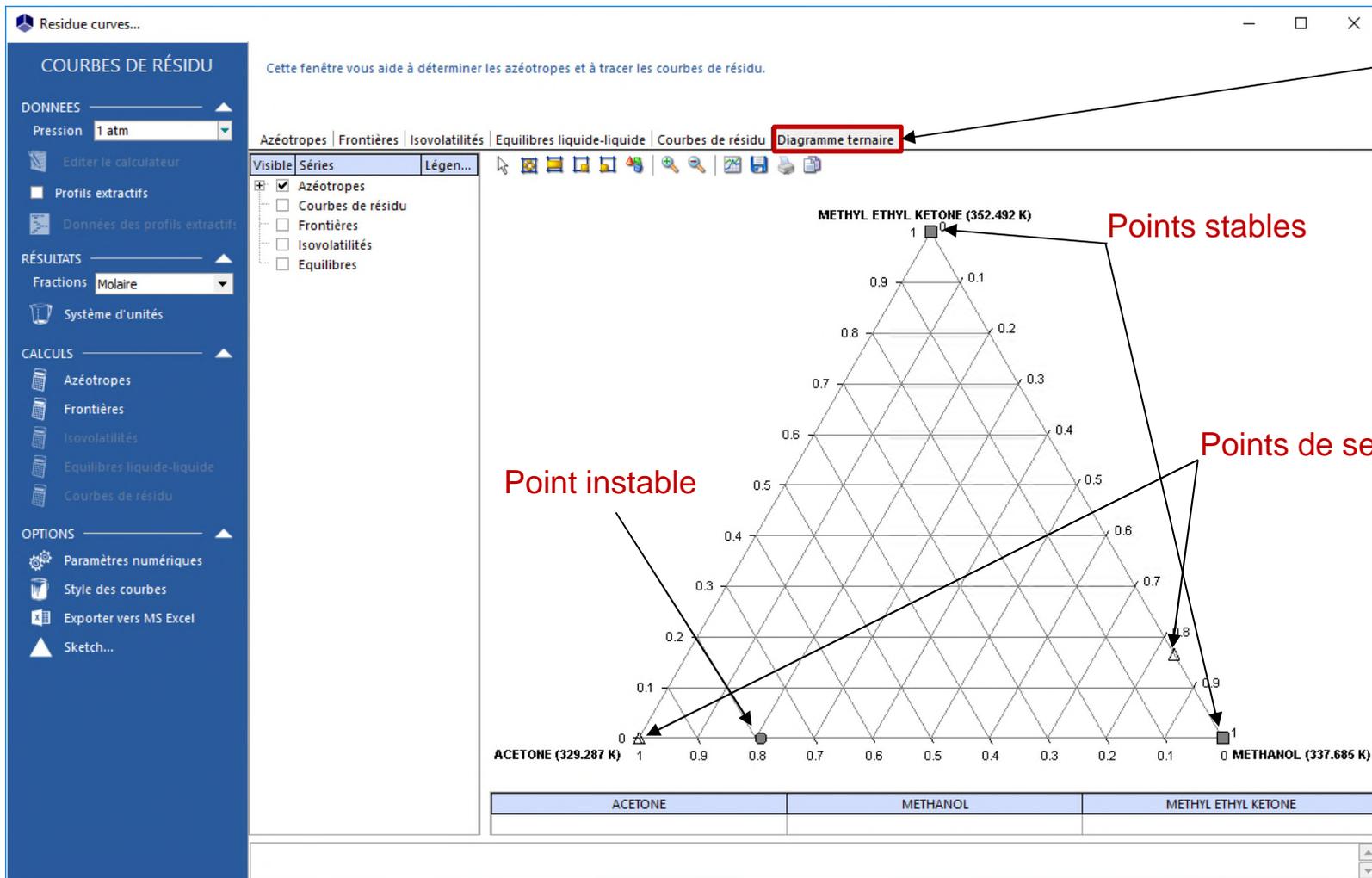
Ajouter
Supprimer
Monter
Descendre

Azéotropes

Pur ?	Nom	Binaire	Ternaire	Système	Températu...	ACETONE	METHANOL	METHYL E...
<input checked="" type="checkbox"/>	ACETONE	Inconnu	Selle	Homogène	56,1366	1	0	0
<input checked="" type="checkbox"/>	METHANOL	Inconnu	Stable	Homogène	64,5348	0	1	0
<input checked="" type="checkbox"/>	METHYL ETH	Inconnu	Stable	Homogène	79,3424	0	0	1
<input type="checkbox"/>	Azéotrope - Instable	Instable	Instable	Homogène	55,3933	0,7912292009	0,2087707990	0
<input type="checkbox"/>	Azéotrope - Instable	Selle	Selle	Homogène	63,9921	0	0,8339922310	0,166007768

Ce système forme deux azéotropes binaires (acétone-méthanol et méthanol-MEK) et aucun azéotrope ternaire.

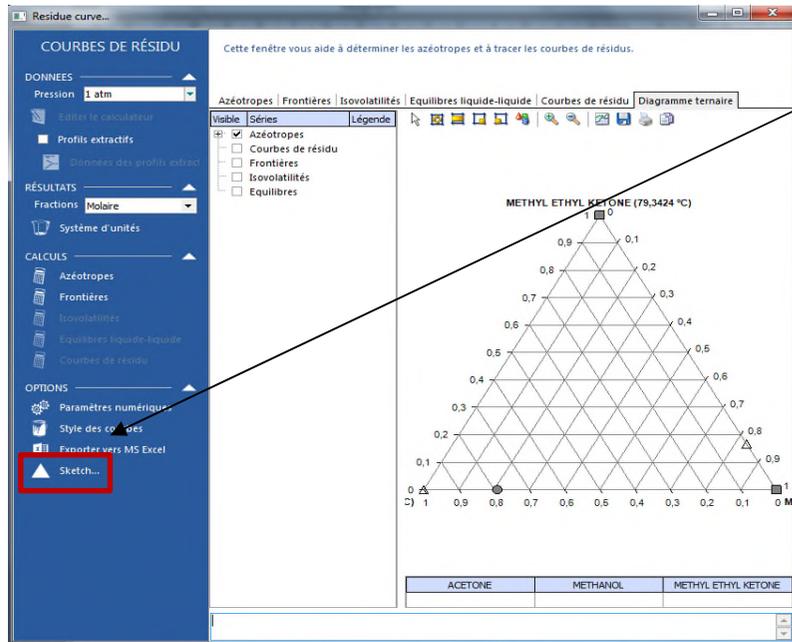
Etape 2 : Tracez le diagramme ternaire



Sélectionnez l'onglet "Diagramme ternaire".

- Les points stables sont représentés par un carré (MEK et méthanol).
- Les points instables sont représentés par un cercle (azéotrope acétone-méthanol).
- Les points de selle sont représentés par un triangle (azéotrope MEK- méthanol et acétone).

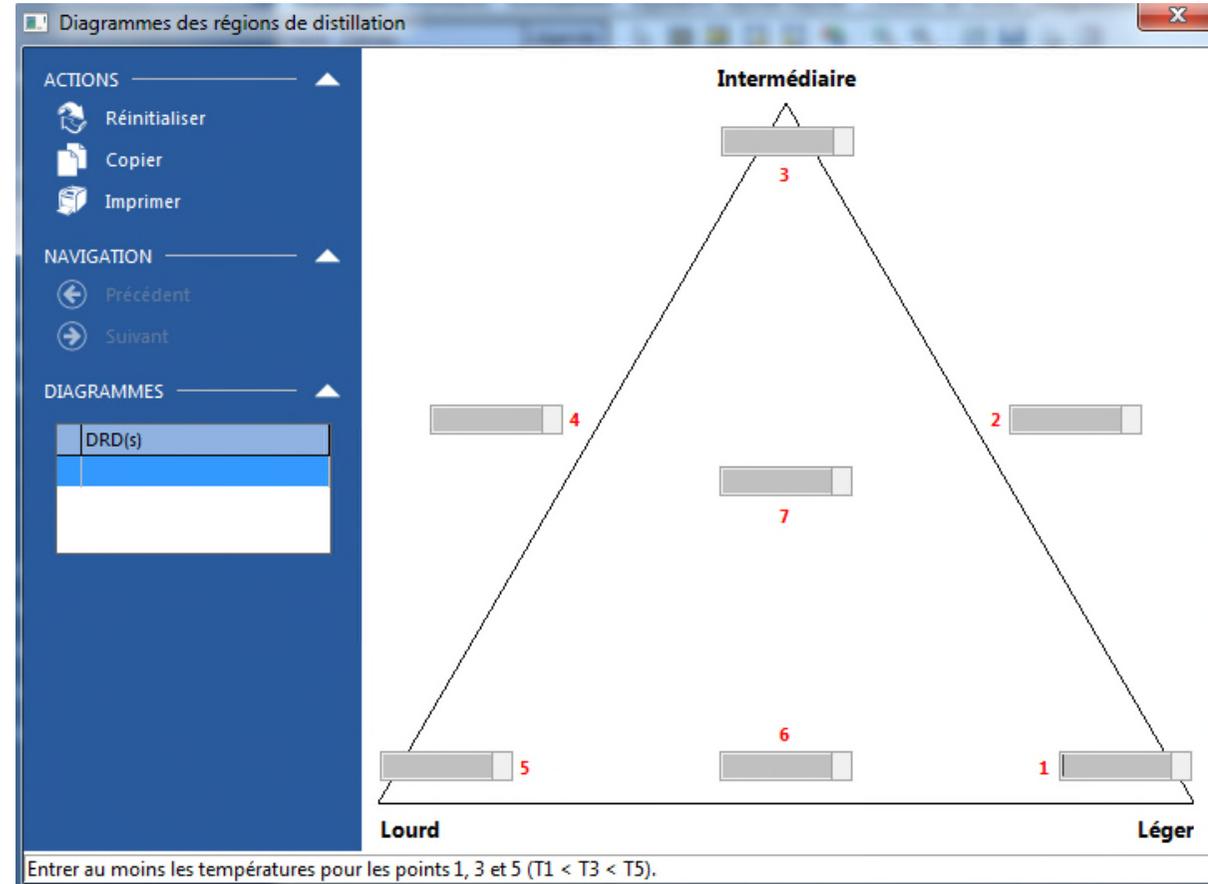
Etape 2 : Tracez le diagramme ternaire



Cliquez sur "Sketch..."

Ce graphique offre une représentation simplifiée du diagramme ternaire.

Dans chaque cellule, entrez les températures calculées précédemment. Dans le cas présent, il n'y a pas d'azéotrope ternaire (cellule #7) ni d'azéotrope binaire entre le lourd et le léger (cellule #6). Toutes les autres cellules peuvent être remplies.



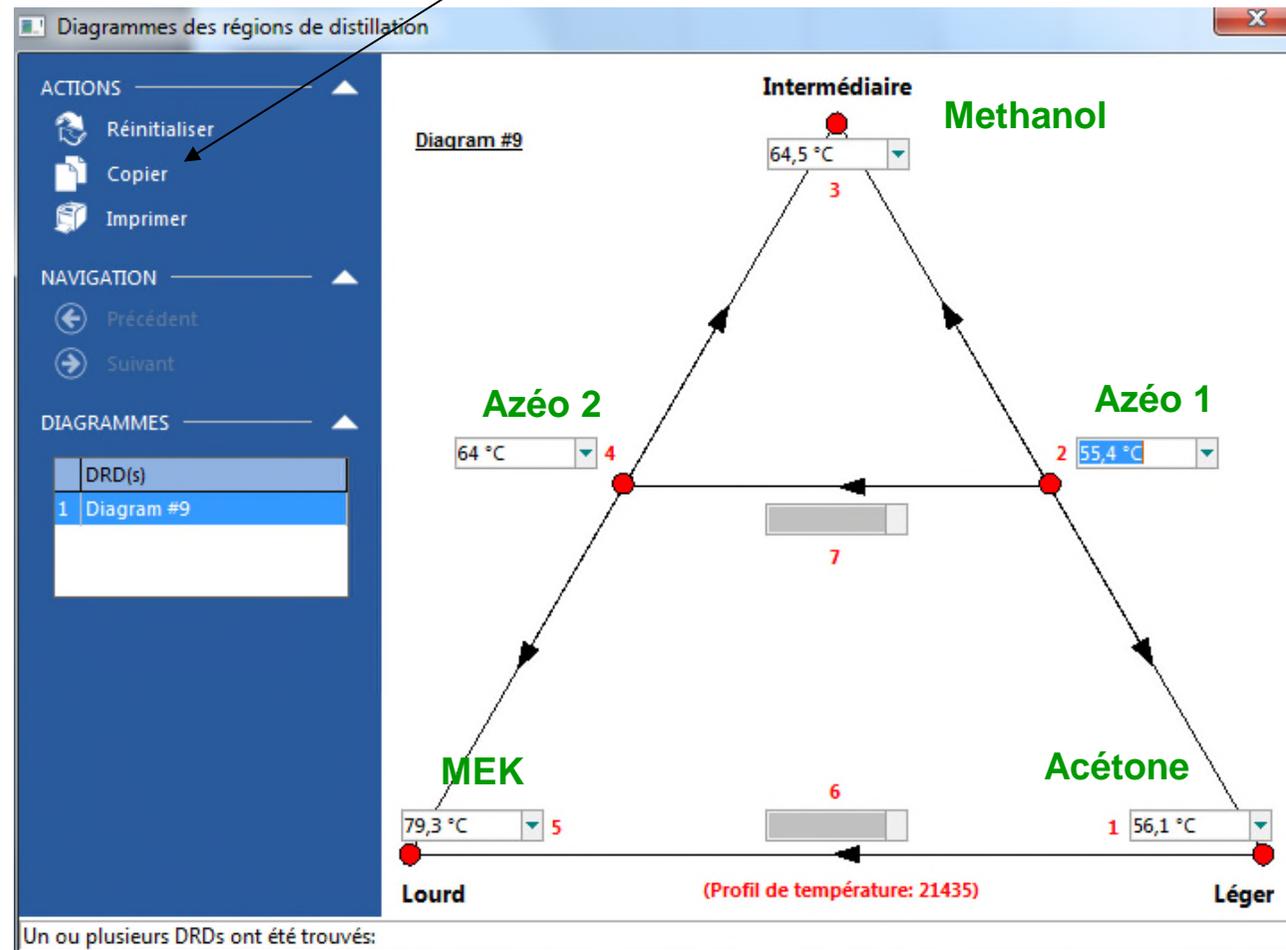
Etape 2 : Tracez le diagramme ternaire

Azéotropes

Pure ?	Nom	Binaire	Ternaire	Système	Température (°C)	METHYL ETHYL ...	ACETONE	METHANOL
<input checked="" type="checkbox"/>	METHYL ETHYL K	Inconnu	Stable	Homogène	79,3424	1,00000	0,00000	0,00000
<input checked="" type="checkbox"/>	ACETONE	Inconnu	Selle	Homogène	56,1366	0,00000	1,00000	0,00000
<input checked="" type="checkbox"/>	METHANOL	Inconnu	Stable	Homogène	64,5348	0,00000	0,00000	1,00000
<input type="checkbox"/>	Azéotrope - 1	Instable	Instable	Homogène	55,3933	0,00000	0,791226	0,208774
<input type="checkbox"/>	Azéotrope - 2	Instable	Selle	Homogène	63,9921	0,166007	0,00000	0,833993

Une fois terminé, vous pouvez copier le diagramme dans d'autres applications.

Une fois les températures renseignées, une flèche apparaît entre chaque binaire (constituant pur ou azéotrope). Cela montre la direction dans laquelle évolue la composition du résidu lorsque l'on augmente la température.



Etape 2 : Tracez le diagramme ternaire

Residue curve...

COURBES DE RÉSIDU

Cette fenêtre vous aide à déterminer les azéotropes et à tracer les courbes de résidus.

Données
Pression 1 atm

Compositions de calcul (Molaire)

	ACETONE	METHANOL	METHYL ETHYL KETONE
	0,06667	0,06667	0,86666
	0,06667	0,86666	0,06667
	0,86666	0,06667	0,06667

Azéotropes

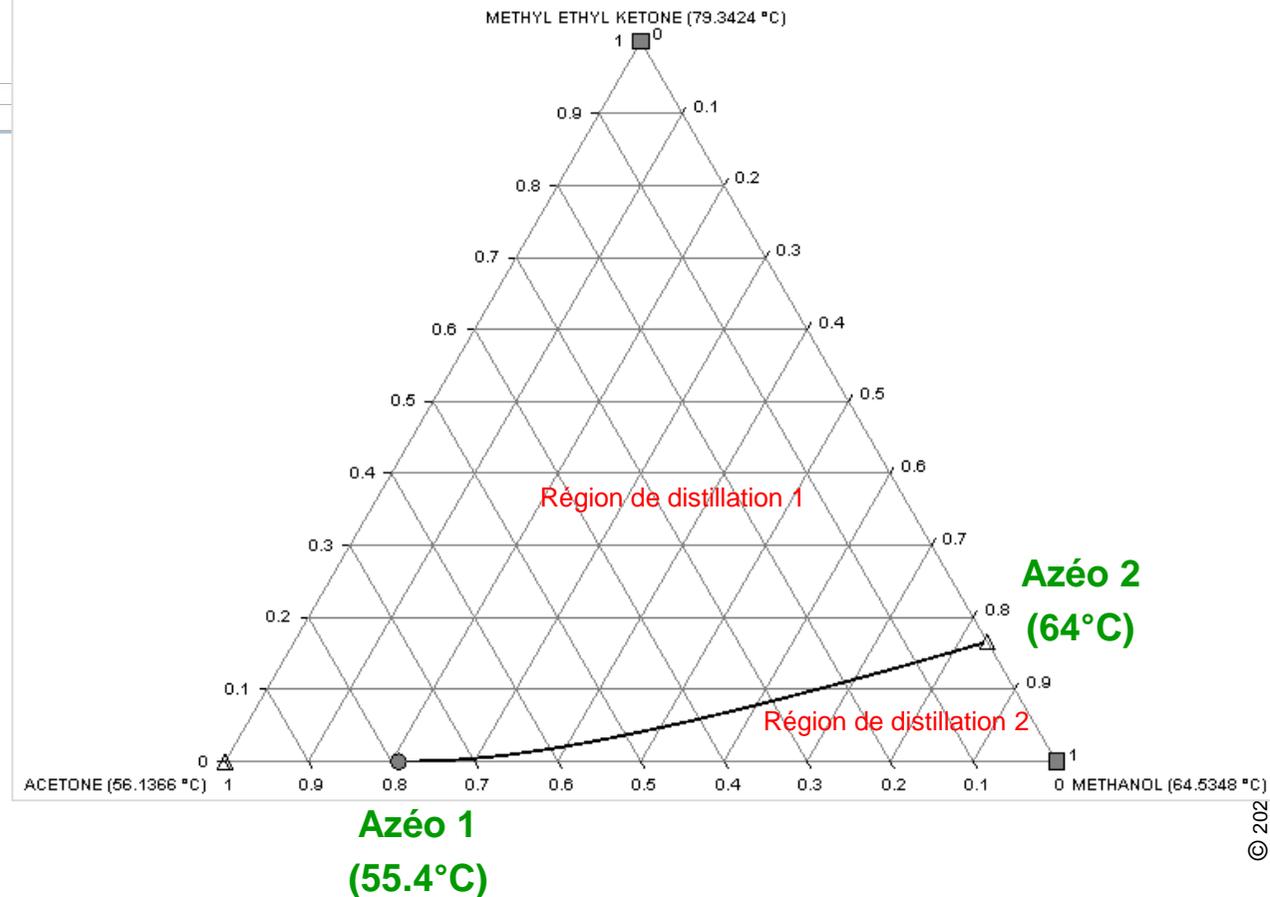
By	Non	Binaire	Ternaire	Système	Température (°C)	ACETONE	METHANOL	METHYL ETHYL...
<input checked="" type="checkbox"/>	ACETONE	Inconnu	Selle	Homogène	56,1366	1	0	0
<input checked="" type="checkbox"/>	METHANOL	Inconnu	Stable	Homogène	64,5348	0	1	0
<input checked="" type="checkbox"/>	METHYL ETHYL K	Inconnu	Stable	Homogène	79,3424	0	0	1
<input type="checkbox"/>	Azéotrope -1	Instable	Instable	Homogène	55,3933	0,79122920097947	0,2087707990205	0
<input type="checkbox"/>	Azéotrope -2	Instable	Selle	Homogène	63,9921	0	0,8339922310812	0,16600768912

Frontières

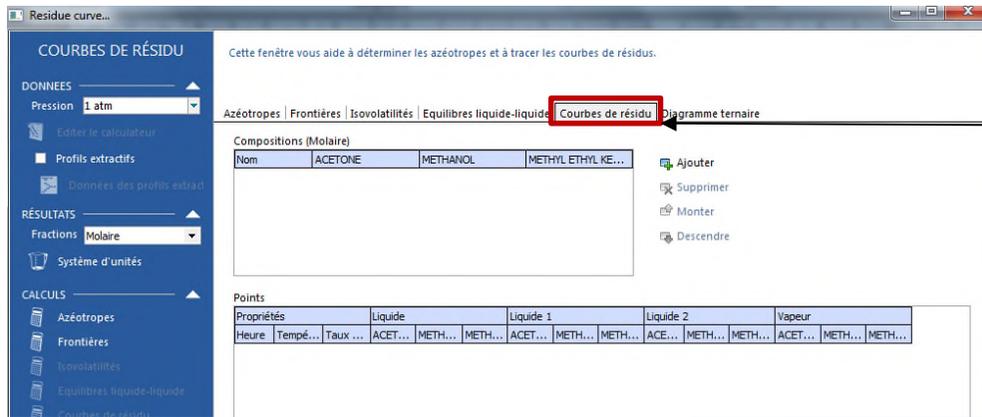
Fermez la fenêtre précédente afin de revenir à la fenêtre principale. Cliquez sur "*Frontières*" pour calculer les frontières de distillation, puis cliquez sur l'onglet "*Diagramme ternaire*".

La courbe de séparation est appelée "*frontière de distillation*" et représente une frontière infranchissable lors d'une distillation.

La présence, la position et la forme des frontières sont importantes pour déterminer la faisabilité d'une distillation. Le distillat et le résidu de chaque colonne à distiller doivent rester dans la même région de distillation.

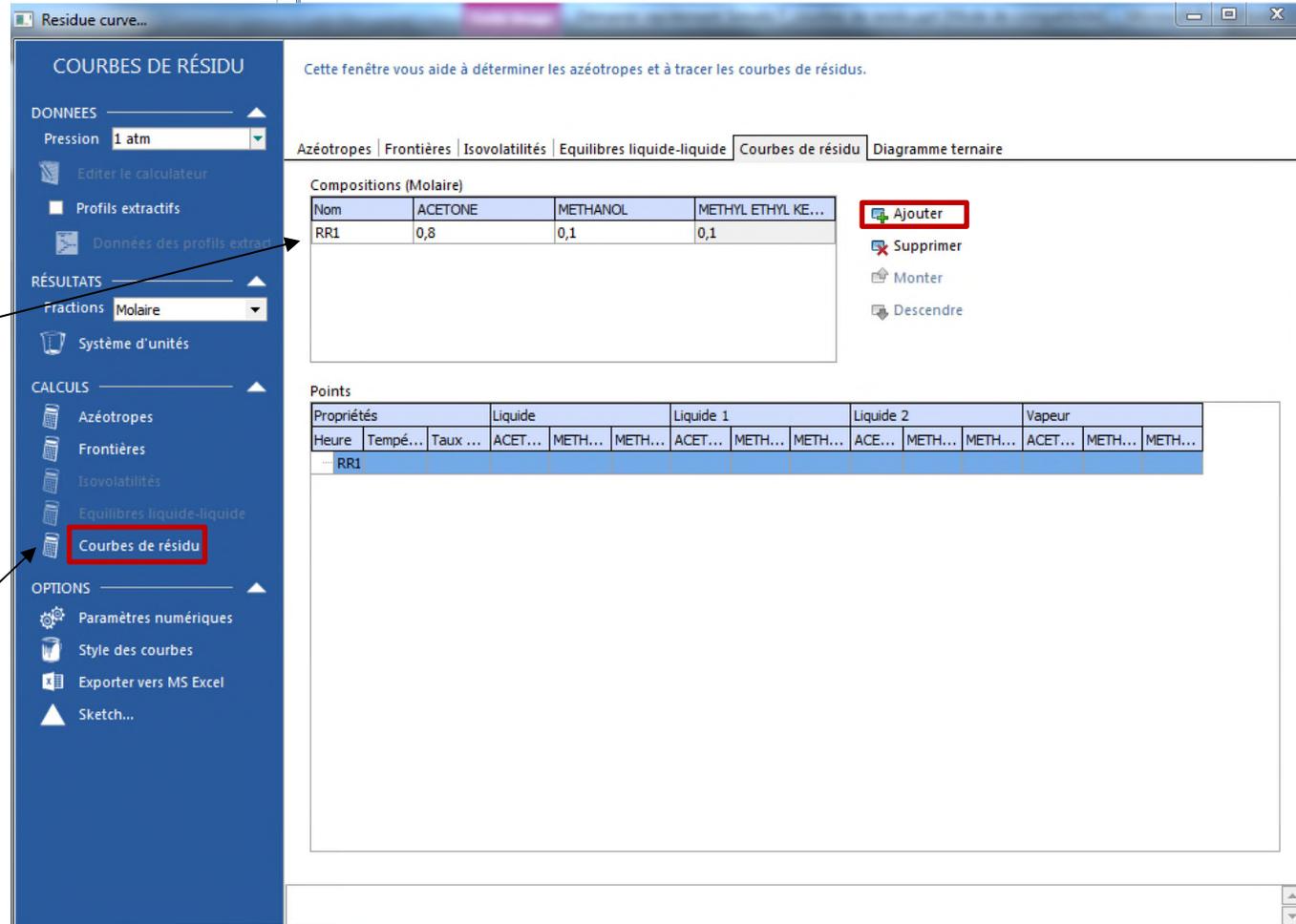


Etape 3 : Tracer les courbes de résidu



Cliquez sur l'onglet "Courbes de résidu".

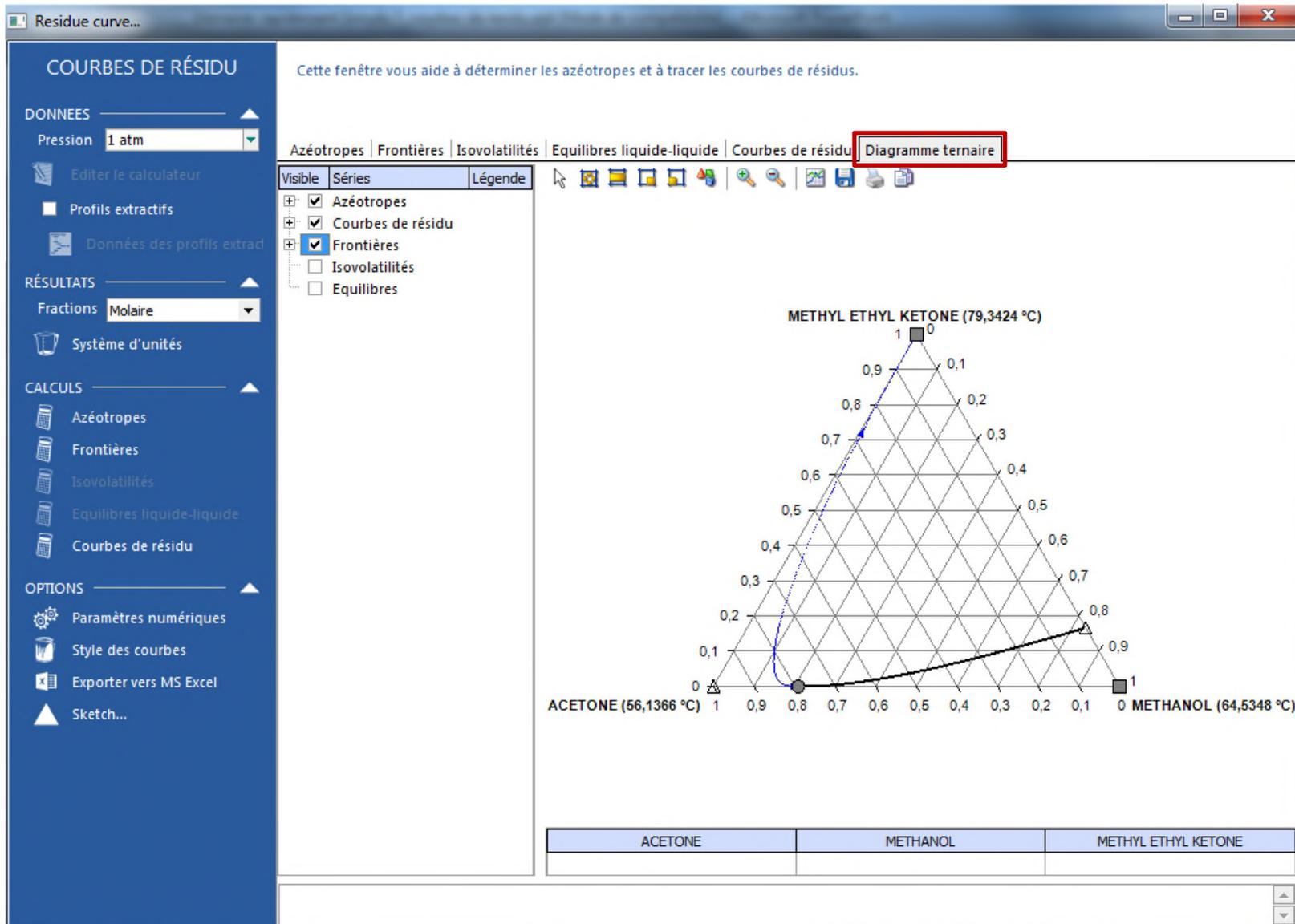
Ajoutez une ligne dans le tableau, dans laquelle vous définirez la composition du mélange.



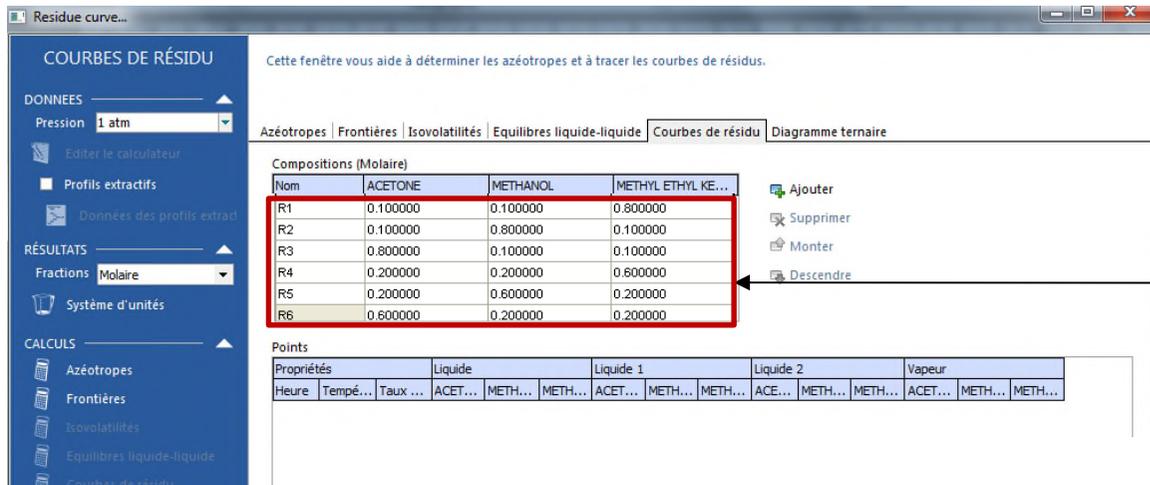
Cliquez sur "Courbes de résidu" pour effectuer les calculs.

Etape 3 : Tracer les courbes de résidu

Cliquez sur l'onglet "*Diagramme ternaire*" afin de visualiser le graphique.



Etape 3 : Tracez les courbes de résidu

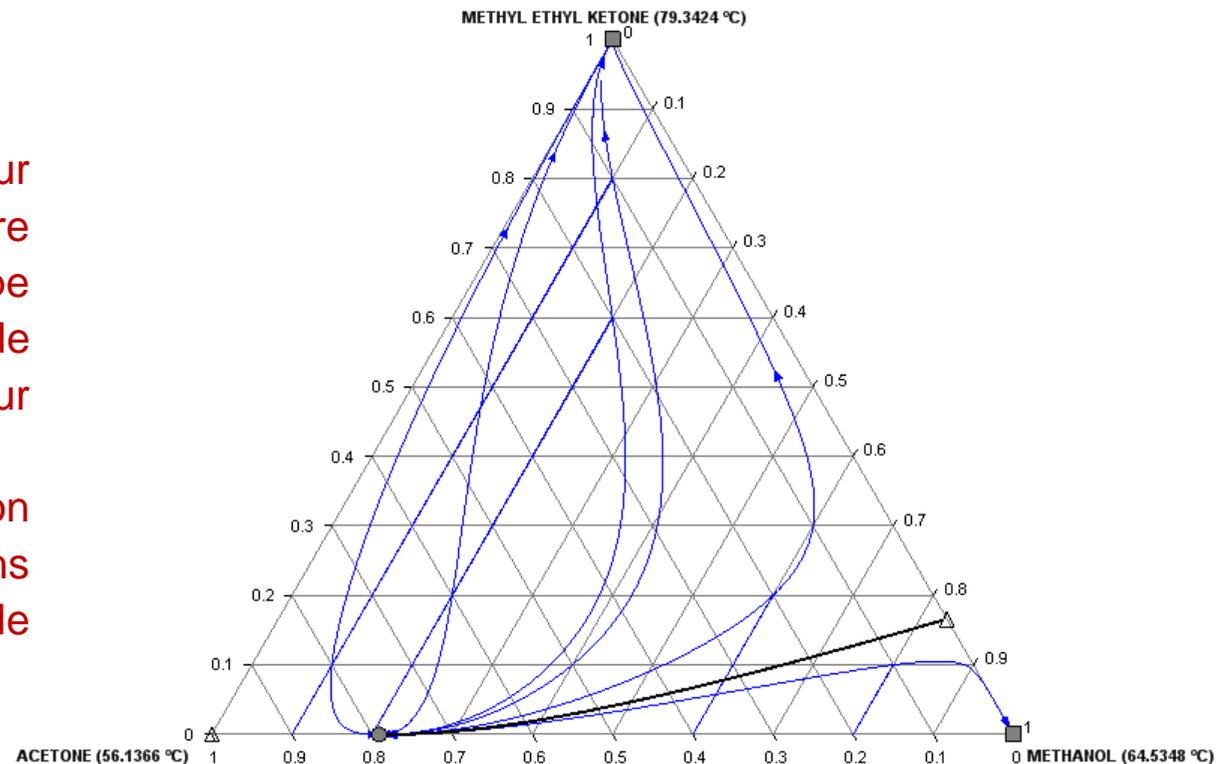


Il est recommandé d'ajouter d'autres compositions pour obtenir d'autres courbes et une vision plus globale du système.

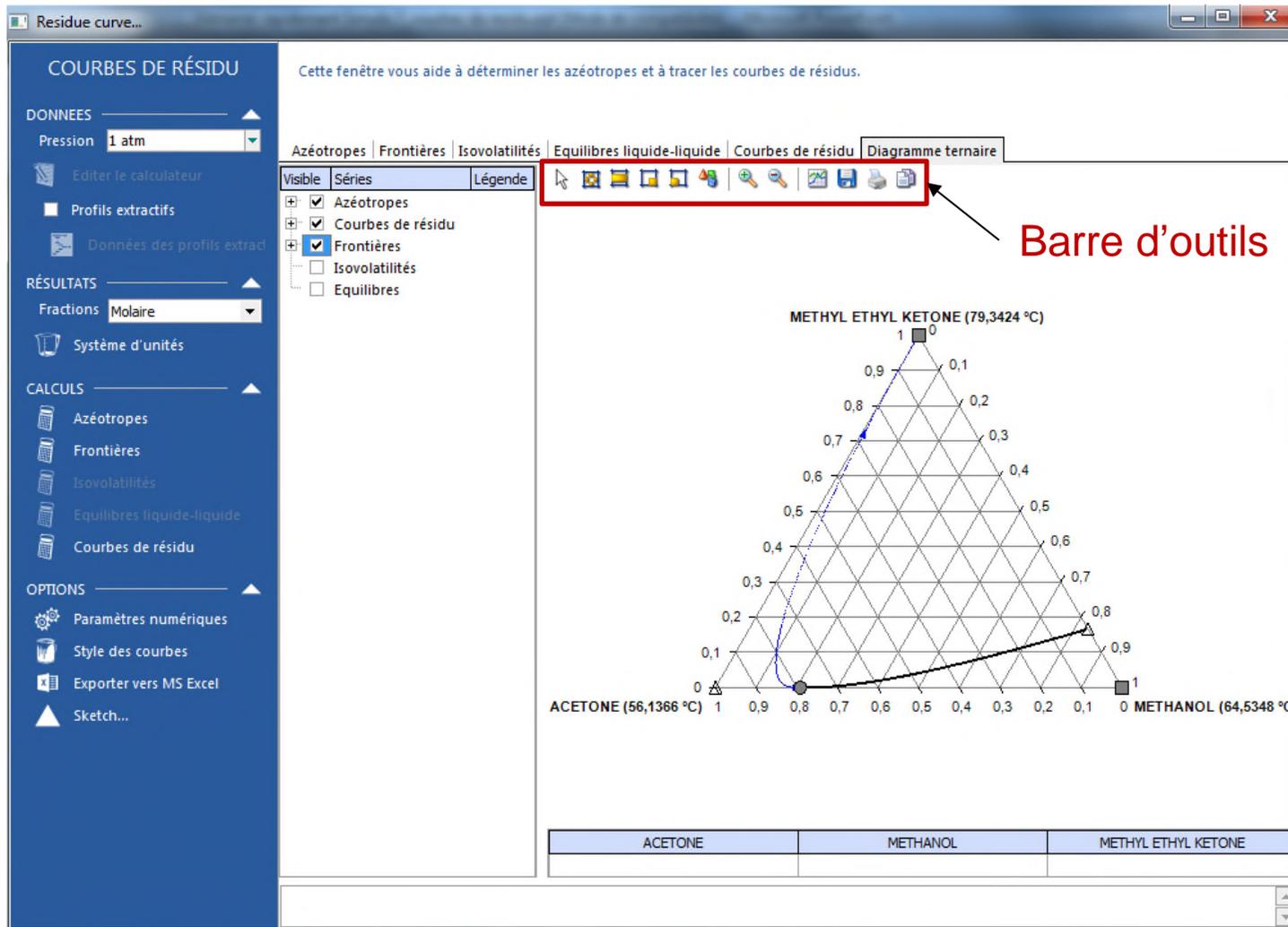
Ici nous rentrons six compositions qui généreront six courbes (de R1 à R6).

Les courbes de résidu prennent leur origine au point ayant la température d'ébullition la plus basse (l'azéotrope acétone-méthanol) et vont soit vers le méthanol, soit vers le MEK selon leur composition initiale.

La position du point d'alimentation détermine la région de distillation dans laquelle vont se trouver le distillat et le résidu potentiels.



Etape 3 : Tracez les courbes de résidu



Les sommets du diagramme peuvent être intervertis. Il est également possible de modifier les propriétés graphiques du diagramme ou des courbes. Enfin, le diagramme peut être copié dans d'autres applications, ou sauvegardé en tant qu'image.

**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
info@prosim.net

**ProSim, Inc.**

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

☎: +1 215 600 3759