

EXEMPLE D'APPLICATION PROSIMPLUS HNO₃

COLONNE A GARNISSAGE POUR L'ABSORPTION DE NO_x

INTERET DE L'EXEMPLE

Cet exemple utilise une colonne à deux lits de garnissage pour absorber les NO_x contenus dans un courant gazeux à l'aide d'une solution d'acide nitrique dilué. Le débit de cette solution est déterminé pour respecter la teneur en NO_x dans le flux de gaz après abattage.

DIFFUSION	<input checked="" type="checkbox"/> Libre Internet	<input type="checkbox"/> Réservée clients	<input type="checkbox"/> Restreinte	<input type="checkbox"/> Confidentielle
------------------	--	---	-------------------------------------	---

FICHIER PROSIMPLUS CORRESPONDANT	<i>PSPH_EX_FR-Colonne-a-garnissage.pmp3</i>
---	---

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

Energy

Fives ProSim

Siège social : Immeuble Stratège A - 51 rue Ampère - 31670 Labège - FRANCE

Tél. : +33 (0)5 62 88 24 30

S.A.S. au capital de 147 800 € - 350 476 487 R.C.S. Toulouse - Siret 350 476 487 00037 - APE 5829C - N° TVA FR 10 350 476 487

www.fivesgroup.com / www.fives-prosim.com

TABLE DES MATIERES

1.	MODELISATION DU PROCEDE	3
1.1.	Présentation du procédé	3
1.2.	Schéma du procédé	4
1.3.	Constituants	5
1.4.	Modèle thermodynamique.....	5
1.5.	Réactions chimiques	5
1.6.	Paramètres opératoires.....	6
2.	RESULTATS	8
2.1.	Bilans matière et énergie	8
2.2.	Performance du procédé.....	8
2.3.	Profils dans la colonne	9

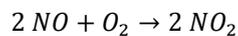
1. MODELISATION DU PROCEDE

1.1. Présentation du procédé

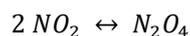
Dans cet exemple l'abattage des NOx présents dans un courant gazeux est réalisé dans une colonne à deux lits de garnissage à l'aide d'une solution aqueuse d'acide nitrique. L'écoulement est à contre-courant. Chacune des deux sections comporte un courant de recirculation assurant un mouillage satisfaisant du garnissage. La description des phénomènes physico-chimiques mis en jeu est basée sur une approche « modèle de transfert » qui suppose que la production d'acide nitrique est réalisée selon le schéma réactionnel décrit ci-après. La théorie du double film est utilisée pour évaluer les différents flux de transfert et il est supposé que les écoulements du liquide et du gaz sont de type « piston ».

- ✓ Réactions en phase gaz

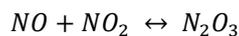
- Oxydation du NO



- Dimérisation du NO₂



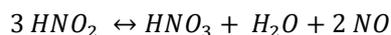
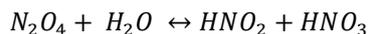
- Formation du N₂O₃



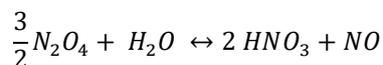
- ✓ Réaction à l'interface gaz-liquide

- Absorption du N₂O₄ avec réactions chimiques

- a. Transfert par diffusion du NO₂ et du N₂O₄ en équilibre de la phase gaz vers l'interface.
- b. Dissolution du N₂O₄ dans l'eau.
- c. Hydrolyse du N₂O₄ et décomposition rapide du HNO₂ :

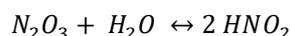


Ces deux réactions sont combinées pour calculer la constante d'équilibre :



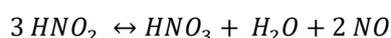
- Absorption du N₂O₃ avec réactions chimiques

- a. Transfert par diffusion du N₂O₃ en équilibre de la phase gaz vers l'interface.
- b. Dissolution du N₂O₃ dans l'eau.
- c. Hydrolyse du N₂O₃ :



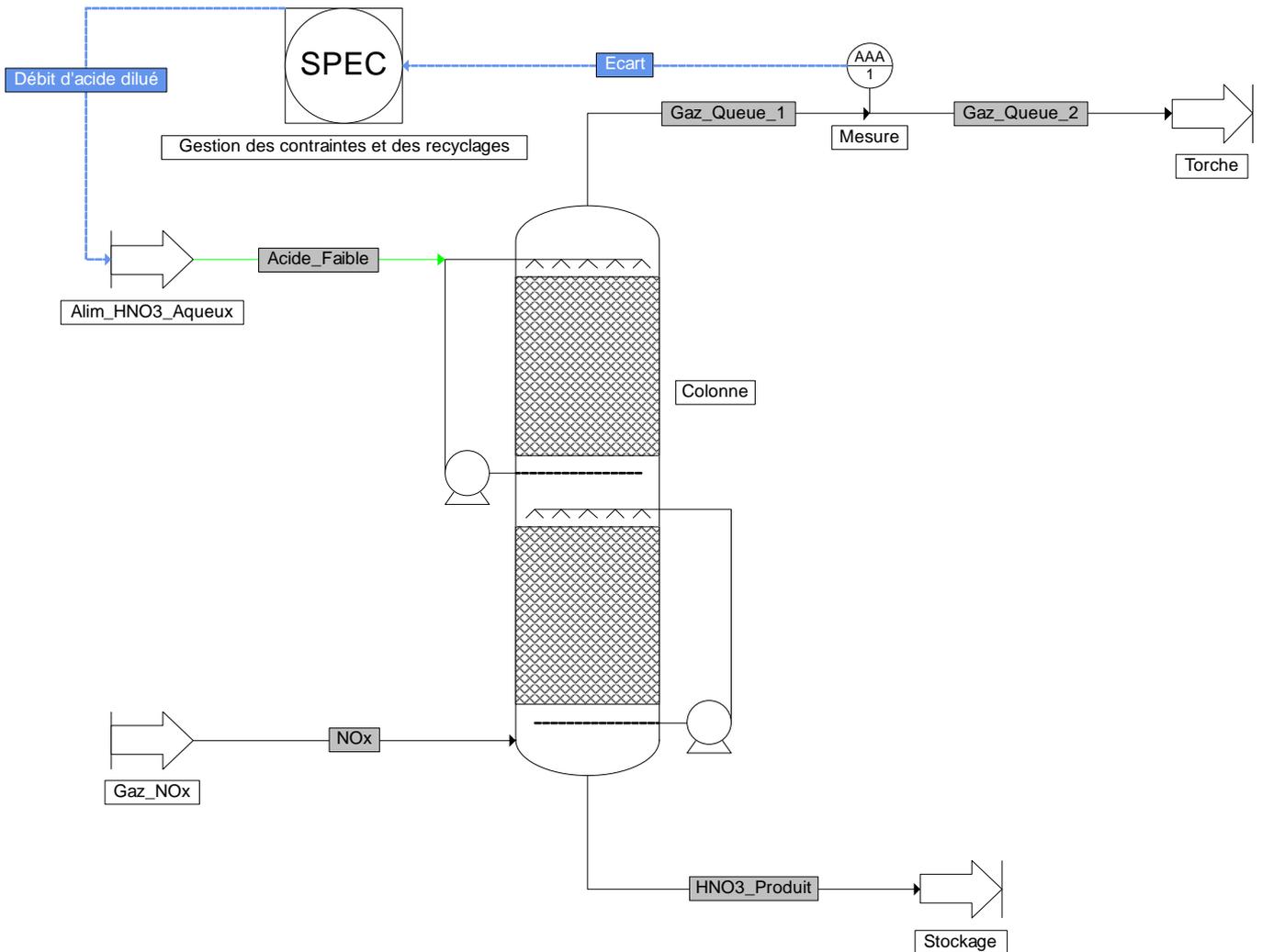
- ✓ Réaction en phase liquide

- Décomposition du HNO₂



1.2. Schéma du procédé

Le flux gazeux contenant les NOx entre dans la colonne par le courant « NOx ». L'acide nitrique dilué servant à abattre les NOx est alimenté par le courant « Acide_Faible ». Le module « Mesure » permet de déterminer l'écart entre la teneur en NOx du courant gazeux sortant de la colonne et la valeur spécifiée : 6 000 ppmv. Le module « Gestion des contraintes et recyclages » minimise cet écart en jouant sur le débit d'alimentation en acide faible.



1.3. Constituants

Les constituants pris en compte dans la simulation, leurs formules chimiques et numéros CAS¹ sont présentés dans le tableau ci-après. Leurs propriétés de corps pur sont extraites de la base de données spécifique « HNO3 » livrée avec ProSimPlus HNO3.

Constituant	Formule chimique	Numéro CAS
Eau	H ₂ O	7732-18-5
Oxyde d'azote	NO	10102-43-9
Dioxyde d'azote	NO ₂	10102-44-0
Tétraoxyde d'azote	N ₂ O ₄	10544-72-6
Azote	N ₂	7727-37-9
Oxygène	O ₂	7782-44-7
Acide nitrique	HNO ₃	7697-37-2
Oxyde nitreux	N ₂ O	10024-97-2
Acide nitreux	HNO ₂	7782-77-6
Trioxyde d'azote	N ₂ O ₃	10544-73-7

1.4. Modèle thermodynamique

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

1.5. Réactions chimiques

Les réactions intervenant dans la colonne d'oxydo-absorption sont pré-codées dans le module et n'ont donc pas besoin d'être décrites par l'utilisateur.

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

1.6. Paramètres opératoires

✓ Alimentations du procédé

Alimentation	NOx	Acide faible
Fraction massique		
Eau	0,0018	0,8351
Oxyde d'azote	0,0304	0
Dioxyde d'azote	0,0340	0
Tétraoxyde d'azote	0,0369	0
Azote	0,3532	0
Oxygène	0,1030	0
Acide nitrique	0	0,1649
Oxyde nitreux	0,4407	0
Débit (kg/h)	5 775	3 360
Température (°C)	21,5	22,1
Pression (bar)	2,45	2,45

✓ Colonne d'oxydo-absorption à garnissage à 2 lits

	Section supérieure	Section inférieure
Garnissage		
Type	Anneaux Raschig	
Matériau	Céramique	
Aire spécifique (m ² /m ³)	120	92
Taille nominale (mm)	38	50
Diamètre équivalent (mm)	35,8	64,55
Fraction de vide (-)	0,68	0,74
Hauteur (m)	4	
Diamètre de colonne (m)	1,98	
Sens de l'écoulement	Contre-courant	
Courant de recirculation		
Débit massique (t/d)	30	60
Température (°C)	20	25
Volume d'oxydation		
Pied (m ³)	4,3	
Milieu (m ³)	6,0	
Tête (m ³)	6,7	

Profil de température dans la colonne	
Température (°C)	29
Profil de pression dans la colonne	
Pertes de charge (bar)	0,2
Paramètres	
Impressions des profils	Massique
Points intermédiaires	10

✓ Spécifications

Spécifications	Valeur
Teneur en NOx (ppmv)	6 000

✓ Variables d'actions

Variables d'actions
Débit d'alimentation en acide faible

✓ Module « Gestion des contraintes et des recyclages »

Les paramètres par défaut sont utilisés pour ce module.

2. RESULTATS

2.1. Bilans matière et énergie

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

Courants		Acide_Faible	Gaz_Queue...	HNO3_Produit	NOx
Débit total	kg/h	9269	4895.9	9948.1	5575
Débit total	Nm3/h	10174	3173.6	10285	3510.2
Fractions massiques					
WATER		0.8351	0.0083989	0.7628	0.0017316
NITRIC OXIDE		0	0.0022362	0	0.03039
NITROGEN DIOXIDE		0	0.0043027	0	0.03398
NITROGEN TETROXIDE		0	0.00023612	0	0.036929
NITROGEN		0	0.40225	0	0.35325
OXYGEN		0	0.080733	0	0.10303
NITRIC ACID		0.1649	8.8888E-006	0.23352	0
NITROUS OXIDE		0	0.50182	0	0.44069
NITROUS ACID		0	0	0.0036802	0
NITROGEN TRIOXIDE		0	1.297E-005	0	0
Fractions molaires					
WATER		0.94656	0.01612	0.91796	0.0034216
NITRIC OXIDE		0	0.0025769	0	0.036053
NITROGEN DIOXIDE		0	0.0032338	0	0.026293
NITROGEN TETROXIDE		0	8.8734E-005	0	0.014287
NITROGEN		0	0.49649	0	0.44889
OXYGEN		0	0.087237	0	0.11462
NITRIC ACID		0.053437	4.8775E-006	0.080342	0
NITROUS OXIDE		0	0.39424	0	0.35644
NITROUS ACID		0	0	0.0016971	0
NITROGEN TRIOXIDE		0	5.9E-006	0	0
Etat physique		Liquide	Vapeur	Liquide	Vapeur
Température	°C	22.1	30.751	29	21.5
Pression	bar	2.45	2.05	2.45	2.45
Flux enthalpique	kW	-35519	1139.8	-35537	1416.3
Fraction molaire vapeur		0	1	0	1

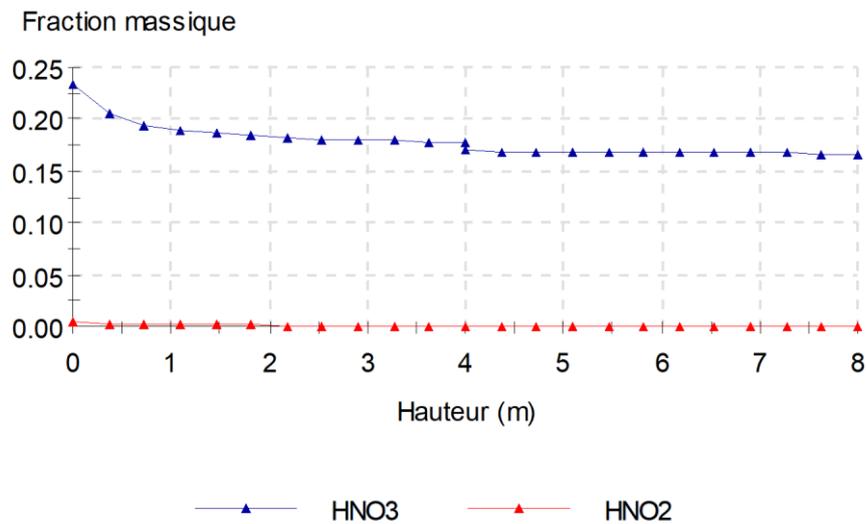
2.2. Performance du procédé

Le gaz entrant dans la colonne a une teneur en NOx de 90 920 ppmv eq. NO. Pour diminuer cette valeur à 6 000 ppmv eq. NO dans le gaz sortant, un débit de 9 267 kg/h d'acide nitrique dilué est nécessaire.

2.3. Profils dans la colonne

La position 0 m correspond au bas de la section inférieure de garnissage (pied de colonne). La position 4 m correspond au haut de la section inférieure de garnissage et au bas de la section supérieure de garnissage (milieu de colonne). La position 8 m correspond au haut de la section supérieure de garnissage (tête de colonne). Les hauteurs correspondant aux volumes d'oxydation (pied, milieu, tête) ne sont pas prises en compte sur ces graphes. Ceci explique le saut sur la courbe d'évolution de la concentration en acide nitrique.

Colonne - Fractions massiques liquide



Colonne - Quantité de NOx

