

**EXEMPLE D'APPLICATION PROSIMPLUS**

**DESACIDIFICATION DE GAZ**

**PAR LE PROCEDE PURISOL**

**INTERET DE L'EXEMPLE**

Cet exemple traite d'un procédé de désacidification d'un flux d'hydrogène par le procédé Purisol. Le solvant utilisé est la N-Methyl-2-Pyrrolidone (NMP). La désacidification est effectuée à travers un contacteur et la régénération du solvant utilise trois flashes successifs. L'objectif du procédé de cet exemple est de diminuer fortement la teneur en CO<sub>2</sub> du gaz entrant. L'appoint de NMP est automatiquement calculé à l'aide de modules simples. Cet exemple est établi d'après [KOH97] qui décrit les principaux éléments de ce procédé.

<b>DIFFUSION</b>	<input checked="" type="checkbox"/> <b>Libre Internet</b>	<input type="checkbox"/> <b>Réservé clients ProSim</b>	<input type="checkbox"/> <b>Restreinte</b>	<input type="checkbox"/> <b>Confidentiel</b>
------------------	---	--	--	--

<b>FICHIER PROSIMPLUS CORRESPONDANT</b>	<a href="#">PSPS_EX_FR-Procede-Purisol.pmp3</a>
---	---

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

## TABLE DES MATIÈRES

<b>1.</b>	<b>MODELISATION DU PROCEDE .....</b>	<b>3</b>
1.1.	Présentation du procédé .....	3
1.2.	Schéma de simulation .....	4
1.3.	Constituants.....	5
1.4.	Modèle thermodynamique .....	5
1.5.	Conditions opératoires.....	6
1.6.	Initialisations .....	8
1.7.	« Trucs et astuces » .....	8
<b>2.</b>	<b>RESULTATS .....</b>	<b>9</b>
2.1.	Bilans matière et énergie.....	9
2.2.	Performance du procédé.....	10
2.3.	Profils dans l'absorbeur .....	11
<b>3.</b>	<b>BIBLIOGRAPHIE .....</b>	<b>13</b>

# 1. MODELISATION DU PROCEDE

## 1.1. Présentation du procédé

Le procédé Purisol utilise la N-Methyl-2-Pyrrolidone (NMP) comme solvant. Ce procédé est particulièrement bien adapté pour la purification des gaz de synthèse à haute pression et haute teneur de CO<sub>2</sub> pour les turbines des cycles combinés à gazéification intégrée (IGCC, Integrated Gasification Combined Cycle) à cause de sa haute sélectivité vis-à-vis du H<sub>2</sub>S. Le procédé Purisol permet également d'éliminer le COS.

La description du procédé est basée sur le schéma de simulation du paragraphe 1.2. Le gaz à traiter (courant 01) est d'abord refroidi dans l'échangeur E101 avant de pénétrer en pied dans l'absorbeur C101 (courant 03). Le solvant régénéré (courant 24) est alimenté en tête de l'absorbeur C101. Le gaz traité sort en tête de l'absorbeur (courant 04) et le solvant enrichi en constituants acides et en hydrocarbures dissous sort en pied (courant 06). Le solvant est régénéré par trois détente successives (V101, V102, V103) allant de la pression opératoire de l'absorbeur (32 bars) à la pression atmosphérique. Le gaz issu de la première détente (courant 08), riche en hydrogène, est comprimé et recyclé en début du procédé. Les gaz issus des deux autres détente (courants 13 et 16) sortent du procédé. Le liquide sortant de la dernière détente (courant 18) constitue le solvant régénéré. Le courant 21 est l'appoint en NMP.



### 1.3. Constituants

Les constituants pris en compte dans la simulation ainsi que leurs formules chimiques et leurs numéros CAS sont présentés dans le tableau ci-après. Les propriétés de corps purs sont extraites de la base de données standard des logiciels ProSim [ROW11].

Constituant	Formule chimique	Numéro CAS
Hydrogen	H <sub>2</sub>	1333-74-0
Nitrogen	N <sub>2</sub>	7727-37-9
Carbon monoxide	CO	630-08-0
Methane	CH <sub>4</sub>	74-82-8
Carbon dioxide	CO <sub>2</sub>	124-38-9
N-methyl-2-pyrrolidone (solvant)	C <sub>5</sub> H <sub>9</sub> NO	872-50-4

### 1.4. Modèle thermodynamique

Compte tenu des niveaux de température et de pression considérés dans ce procédé et de la présence de constituants polaires (notamment le solvant), un modèle combiné, le modèle PSRK [HOL91], [GME95], [CHE02] est utilisé. Ce modèle est un modèle prédictif ne nécessitant pas d'action de la part de l'utilisateur si les décompositions en groupements fonctionnels des molécules sont renseignées et si les paramètres d'interaction entre groupements sont disponibles.

### 1.5. Conditions opératoires

- ✓ Alimentation du procédé

	<b>Gaz brut</b>
<b>Température (°C)</b>	40
<b>Pression (bar)</b>	32
<b>Débit total (Nm<sup>3</sup>/h)</b>	110 000
<b>Fraction molaire</b>	
<b>Hydrogen</b>	0,6453
<b>Nitrogen</b>	0,0038
<b>Carbon monoxide</b>	0,0150
<b>Methane</b>	0,0044
<b>Carbon dioxide</b>	0,3315
<b>Solvant</b>	0

- ✓ Absorbeur C101

<b>Paramètres de fonctionnement</b>	<b>Valeur</b>
Type de colonne	Absorbeur
Nombre d'étages théoriques	10
Pression de tête (bar)	32

- ✓ Vannes

<b>Paramètres de fonctionnement</b>	<b>Valeur</b>
Type de vanne	Vanne de détente
Pression (bar)	
V101	11
V102	5
V103	1,1

- ✓ Séparateurs B101, B102 et B103

<b>Paramètres de fonctionnement</b>	<b>Valeur</b>
Type de séparateur	Séparateur diphasique L-V
Type de flash	Flash à pression et quantité de chaleur échangée données
Quantité de chaleur échangée	Adiabatique
Pression	La plus faible des alimentations

## ✓ Echangeurs E101, E102 et E103

Paramètres de fonctionnement	Valeur
Type d'échangeur	Consignateur de température
Température de sortie (°C)	-15

## ✓ Compresseur K101

Paramètres de fonctionnement	Valeur
Efficacité isentropique	0,84
Efficacité mécanique	1
Pression de refoulement (bar)	32

## ✓ Pompe P101

Paramètres de fonctionnement	Valeur
Type de pompe	Pompe centrifuge
Efficacité volumétrique	0,65
Efficacité mécanique	1
Pression de refoulement (bar)	32

## ✓ Mélangeurs M101, M102 et M103

Paramètres de fonctionnement	Valeur
Type de mélangeur	Autre mélangeur
Pression de sortie	La plus faible des alimentations

## ✓ Séparateurs S101 et S102

Paramètres de fonctionnement	Valeur
Type de séparateur	Séparateur de constituants
Taux récupération en tête	
N-methyl-2-pyrrolidone (solvant)	0
Autres constituants	1

## 1.6. Initialisations

Le débit et la pureté du solvant (N-méthyl-2-pyrrolidone) circulant dans la boucle sont initialisés dans le courant de solvant enrichi sortant de l'absorbeur C101 (courant 06). Le débit et la pureté ont été choisis afin d'obtenir moins de 4% molaire de CO<sub>2</sub> dans le gaz traité.

	<b>Solvant enrichi (courant 06) Initialisation</b>
<b>Température (°C)</b>	-2
<b>Pression (bar)</b>	32
<b>Débit massique partiel (kg/h)</b>	
<b>Hydrogen</b>	0
<b>Nitrogen</b>	0
<b>Carbon monoxide</b>	0
<b>Methane</b>	0
<b>Carbon dioxide</b>	83 541
<b>Solvant</b>	700 000

## 1.7. « Trucs et astuces »

Les séparateurs de constituants S101 et S102 servent à collecter le solvant (N-méthyl-2-pyrrolidone) perdu dans le gaz traité (courant 04) et dans les gaz issus des flashes (courants 13 et 16). Cette quantité de solvant constitue l'appoint nécessaire. Afin de satisfaire le bilan matière, elle est recyclée dans le procédé via le courant 21.

## 2. RESULTATS

### 2.1. Bilans matière et énergie

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

Courants		01	03	04	06	09	10	11
Débit total	kg/h	80914	83401	14951	7.8208E005	2487.1	2487.1	7.796E005
Débit total	Nm3/h	1.1E005	1.1172E005	76324	2.0061E005	1719.8	1719.8	1.9889E005
Fractions massiques								
HYDROGEN		0.078901	0.077039	0.42659	6.0321E-005	0.01647	0.01647	7.9684E-006
NITROGEN		0.0064566	0.0063283	0.034847	8.6814E-006	0.0021555	0.0021555	1.8326E-006
CARBON MONOXIDE		0.025484	0.025064	0.13721	4.9771E-005	0.011414	0.011414	1.3517E-005
METHANE		0.0042813	0.0042715	0.022271	2.977E-005	0.0039521	0.0039521	1.7257E-005
CARBON DIOXIDE		0.88488	0.8873	0.37907	0.10481	0.96599	0.96599	0.10206
N-METHYL-2-PYRROLIDONE		0	4.1327E-007	1.1962E-005	0.89504	1.3858E-005	1.3858E-005	0.8979
Fractions molaires								
HYDROGEN		0.6453	0.63944	0.92912	0.0026147	0.26483	0.26483	0.00034728
NITROGEN		0.0038	0.0037799	0.0054617	2.7079E-005	0.0024941	0.0024941	5.7473E-006
CARBON MONOXIDE		0.015	0.014972	0.021508	0.00015527	0.013208	0.013208	4.2398E-005
METHANE		0.0044	0.0044552	0.0060953	0.00016215	0.0079852	0.0079852	9.4504E-005
CARBON DIOXIDE		0.3315	0.33735	0.037817	0.20809	0.71148	0.71148	0.20374
N-METHYL-2-PYRROLIDONE		0	6.9756E-008	5.2978E-007	0.78895	4.5314E-006	4.5314E-006	0.79577
Etat physique		Vapeur	Vapeur	Vapeur	Liquide	Vapeur	Liq./Vap.	Liquide
Température	°C	40	-15	-15.031	-1.92	83.4	-15	-1.3307
Pression	bar	32	32	32	32	32	32	11
Flux enthalpique	kcal/h	5.3545E005	-1.7951E006	-9.3776E005	-1.1437E008	35228	-43627	-1.1435E008
Fraction molaire vapeur		1	1	1	0	1	0.99997	0

Courants		13	14	16	18	21	23	24
Débit total	kg/h	24901	7.547E005	41064	7.1363E005	1.2924	7.1363E005	7.1363E005
Débit total	Nm3/h	12762	1.8613E005	20915	1.6522E005	0.29221	1.6522E005	1.6522E005
Fractions massiques								
HYDROGEN		0.00024748	6.5851E-008	1.2093E-006	5.7272E-011	0	5.7272E-011	5.7272E-011
NITROGEN		5.6578E-005	2.6279E-008	4.8229E-007	3.9248E-011	0	3.9248E-011	3.9248E-011
CARBON MONOXIDE		0.00041517	2.6518E-007	4.8643E-006	5.3297E-010	0	5.3297E-010	5.3297E-010
METHANE		0.00050034	1.3175E-006	2.3983E-005	1.3211E-008	0	1.3211E-008	1.3211E-008
CARBON DIOXIDE		0.99877	0.072474	0.99995	0.019106	0	0.019106	0.019106
N-METHYL-2-PYRROLIDONE		1.216E-005	0.92752	1.9743E-005	0.98089	1	0.98089	0.98089
Fractions molaires								
HYDROGEN		0.0053691	2.9687E-006	2.6398E-005	2.7506E-009	0	2.7506E-009	2.7506E-009
NITROGEN		8.8329E-005	8.5253E-008	7.5764E-007	1.3564E-010	0	1.3564E-010	1.3564E-010
CARBON MONOXIDE		0.00064824	8.6038E-007	7.6424E-006	1.8422E-009	0	1.8422E-009	1.8422E-009
METHANE		0.001364	7.4633E-006	6.579E-005	7.9729E-008	0	7.9729E-008	7.9729E-008
CARBON DIOXIDE		0.99252	0.14966	0.99989	0.042029	0	0.042029	0.042029
N-METHYL-2-PYRROLIDONE		5.3648E-006	0.85033	8.7644E-006	0.95797	1	0.95797	0.95797
Etat physique		Vapeur	Liquide	Vapeur	Liquide	Liquide	Liquide	Liquide
Température	°C	-5.9851	-5.9851	-14.366	-14.366	-7.0429	-13.862	-15
Pression	bar	5	5	1.1	1.1	1.1	32	32
Flux enthalpique	kcal/h	-1.8615E005	-1.1416E008	-3.3001E005	-1.1383E008	-202.59	-1.1306E008	-1.1351E008
Fraction molaire vapeur		1	0	1	0	0	0	0

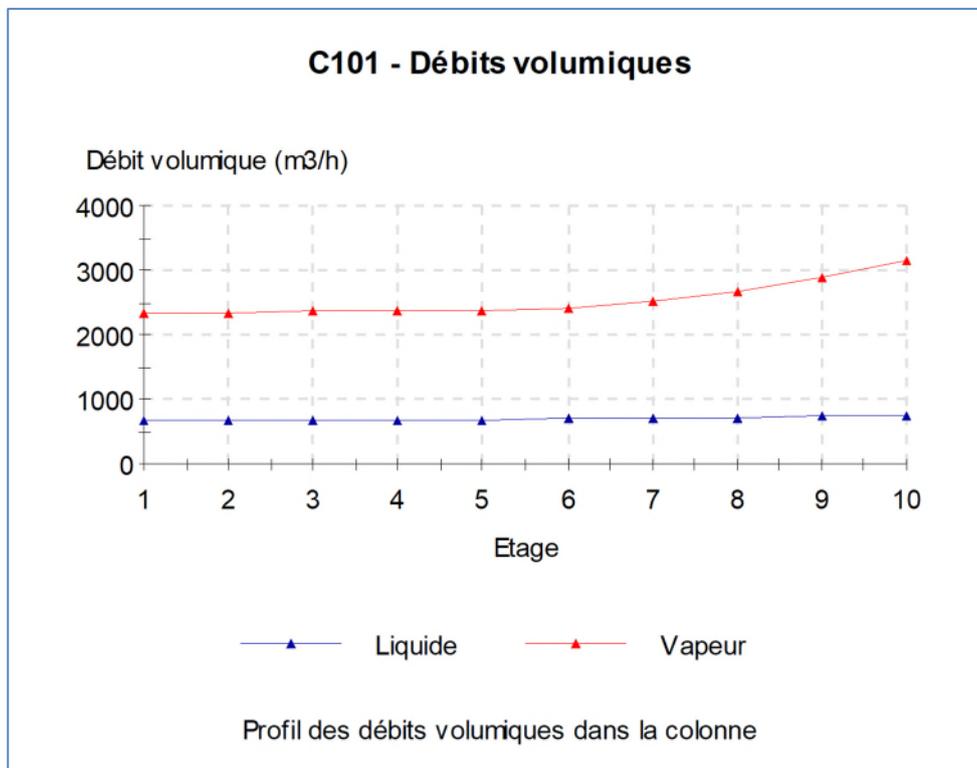
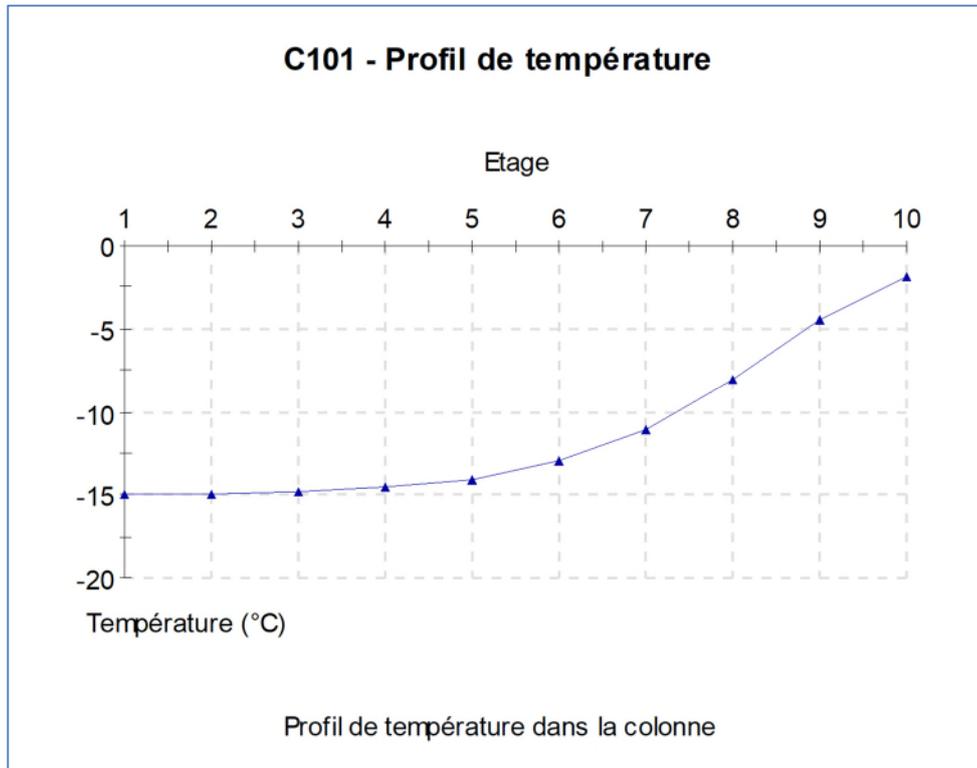
## 2.2. Performance du procédé

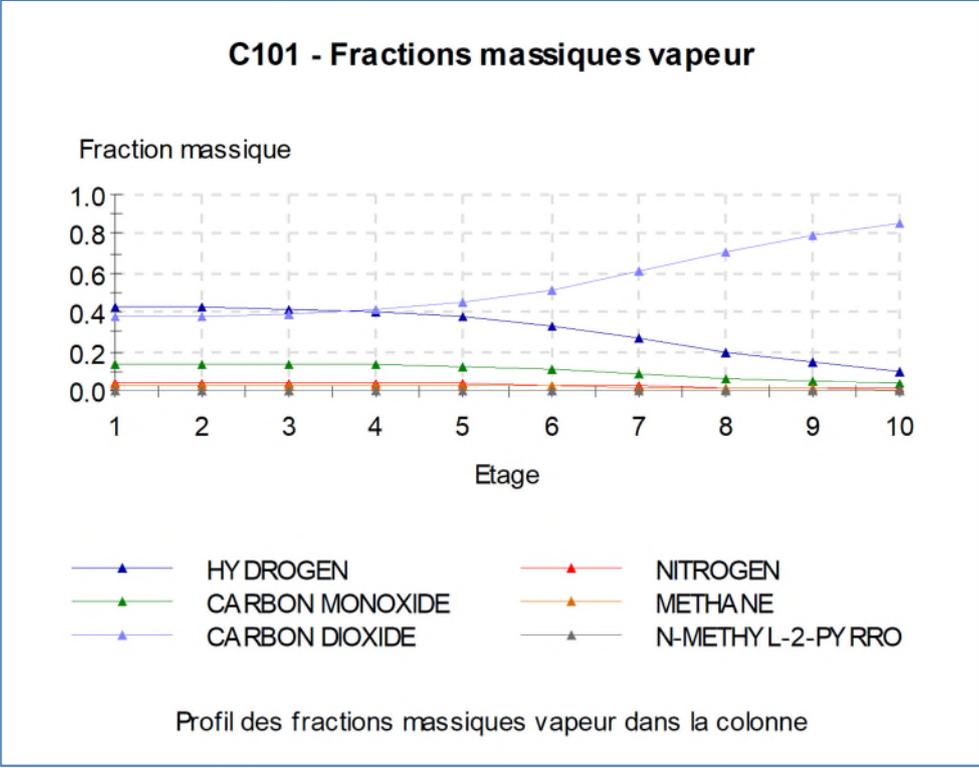
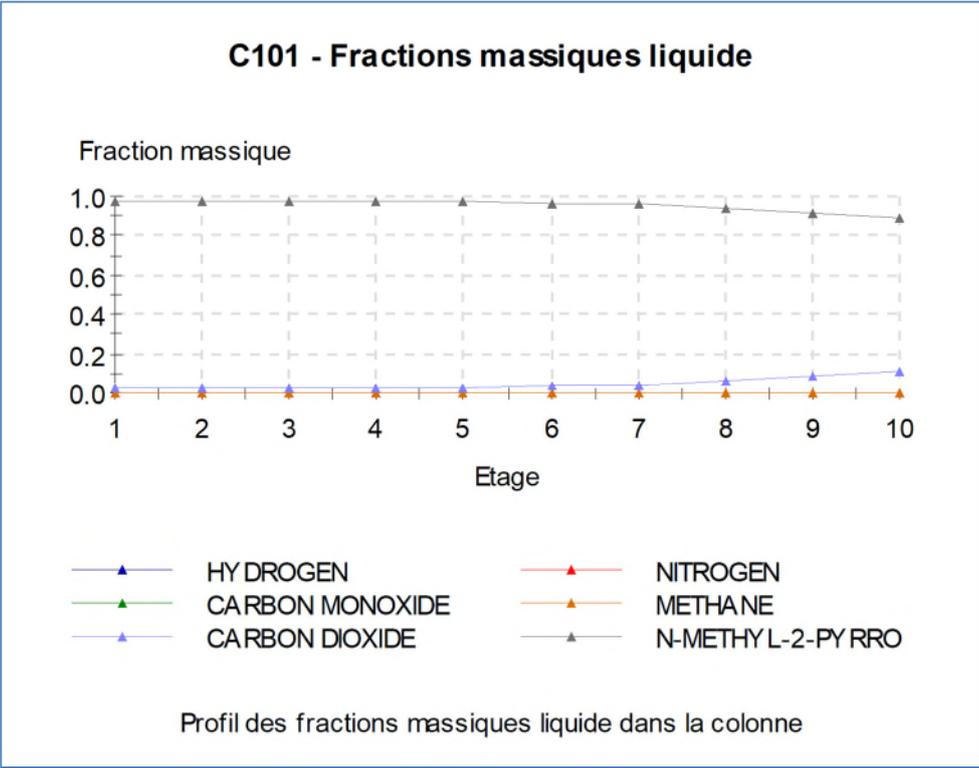
Le tableau suivant présente les teneurs en CO<sub>2</sub> dans le gaz brut et dans le gaz traité.

Constituant	Gaz brut	Gaz traité
CO <sub>2</sub>	33,15% mol.	3,78% mol.

### 2.3. Profils dans l'absorbeur

Dans ProSimPlus, les étages des colonnes sont numérotés de haut en bas (le premier étage correspond au plateau de tête et le dernier étage au plateau de pied).





### 3. BIBLIOGRAPHIE

- [CHE02] CHEN J., FISCHER K., GMEHLING J., "Modification of PSRK Mixing Rules and Results for Vapor – Liquid Equilibria, Enthalpy of Mixing and Activity Coefficients at Infinite Dilution", Fluid Phase Equilib., 200, 411-429 (2002)
- [GME95] GMEHLING J., "From UNIFAC to Modified UNIFAC to PSRK with the Help of DDB", Fluid Phase Equilib., 107, 1-29 (1995)
- [HOL91] HOLDERBAUM T., GMEHLING J., "PSRK: A Group Contribution Equation of State Based on UNIFAC", Fluid Phase Equilib., 70, 251-265 (1991)
- [KOH97] KOHL A., NIELSEN R., "Gas Purification", Gulf Publishing, 5<sup>th</sup> edition (1997)
- [ROW11] ROWLEY R.L., WILDING W.V., OSCARSON J.L., GILES N.F., "DIPPR® Data Compilation of Pure Chemical Properties", Design Institute for Physical Properties, AIChE, New York, NY (2011)