EXEMPLE D'APPLICATION DE PROSIMPLUS

UNITE DE PRODUCTION DE CYCLOHEXANE

INTERET DE L'EXEMPLE
Cet exemple correspond à une unité de production de cyclohexane. Il s'agit d'un procédé assez typique de l'industrie chimique constitué d'une section réactionnelle afin de synthétiser le produit d'intérêt suivie d'une section dans laquelle est effectuée la séparation des produits et sous-produits. Les points particuliers qui sont détaillés au niveau de cet exemple sont : • La mise en œuvre d'un module de gestion des contraintes afin d'atteindre une spécification. • Le découplage d'un échangeur de chaleur entre un consignateur de température et un simple échangeur afin d'éviter un courant de recyclage, en utilisant un courant d'information.

DIFFUSION	☑ Libre-Internet	☐ Réservée clients	☐ Restreinte	☐ Confidentielle

FICHIER PROSIMPLUS CORRESPONDANT	*PSPS_EX_FR-Unite-Production-Cyclohexane.pmp3*

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.

TABLE DES MATIÈRES

1. MODÉLISATION DU PROCÉDÉ 3
1.1. Présentation du procédé 3
1.2. Schéma du procédé 3
1.3. Spécifications 4
1.4. Constituants 4
1.5. Modèle thermodynamique 4
1.6. Conditions opératoires 4
1.7. "Trucs et astuces" 6
1.7.1. Module *Gestion des Contraintes* 6
1.7.2. Découplage échangeur de chaleur 7
2. RÉSULTATS 7
2.1. Commentaires sur les résultats 7
2.2. Bilans matière et énergie 8
2.3. Profils dans la colonne C101 9
3. BIBLIOGRAPHIE 10

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France – Tous droits réservés

1. MODÉLISATION DU PROCÉDÉ

1.1. Présentation du procédé

Cet exemple est extrait d'une publication [1] qui décrit sommairement le procédé. L'objectif de ce procédé est de produire du cyclohexane par l'hydrogénation catalytique du benzène en phase vapeur. Le mélange réactionnel entre dans le réacteur en phase vapeur où il est mis en contact avec un catalyseur de nickel sur silicium. Il se produit alors la réaction suivante :

$$C_6H_6 + 3H_2 \rightarrow C_6H_{12}$$

Le taux de conversion du réacteur (R101) est de 99,9% molaire par rapport au benzène. Le réacteur est de type piston et les conditions opératoires sont telles que l'isomérisation du cyclohexane en methyl-cyclopentane n'a pas lieu. Les vapeurs à la sortie du réacteur préchauffent l'alimentation du réacteur. Elles sont ensuite refroidies avant d'entrer dans un ballon de séparation liquide-vapeur (S101). L'hydrogène séparé est ensuite recyclé (courants C12-C13). Une purge est effectuée afin d'éviter l'accumulation de méthane (composant inerte présent dans le courant d'hydrogène alimenté). Par ailleurs, le liquide du séparateur est envoyé dans une colonne à distiller (C101 des courants C14 - C15 - C16), afin de séparer les constituants légers (courant C17) du cyclohexane qui est obtenu en pied de colonne avec les spécifications souhaitées (courants C18 – C19 – C20).

1.2. Schéma du procédé

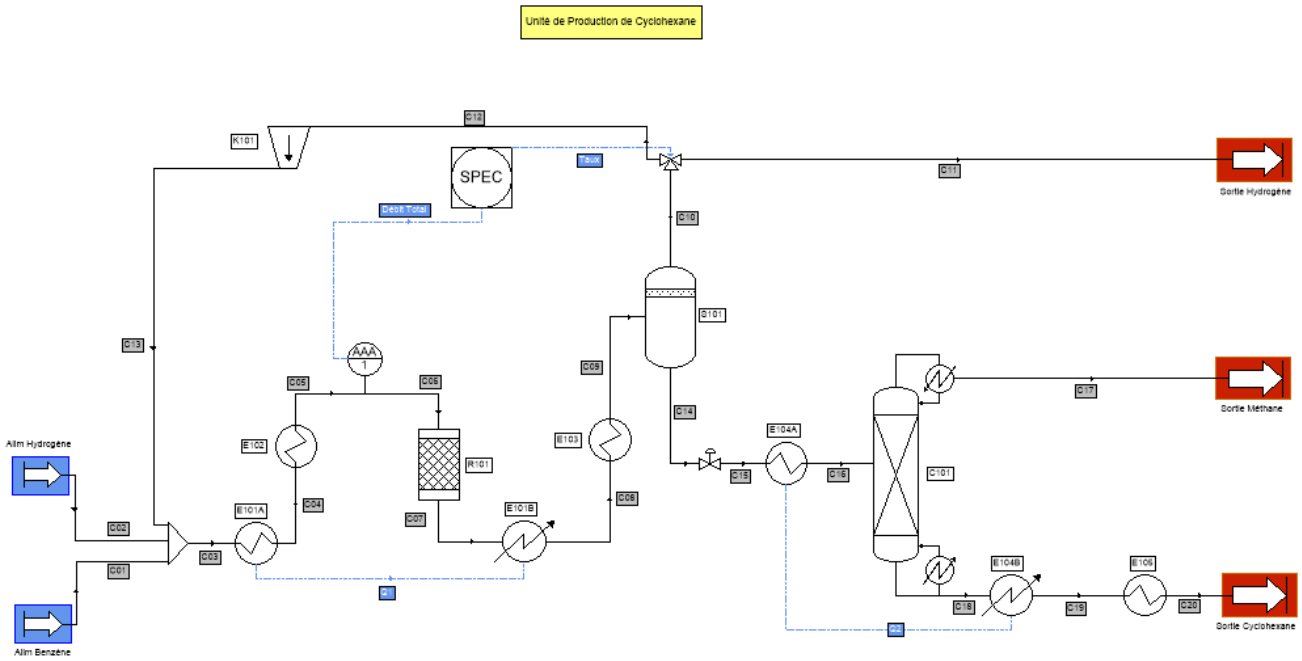


Schéma de l'unité de production de cyclohexane

1.3. Spécifications

Les spécifications imposées sur le procédé sont les suivantes :

- ✓ Débit molaire total égal à 5000 kmol/hr à l'entrée du réacteur R101
- ✓ Et au niveau de la colonne de distillation :
  - Pureté du cyclohexane : ≥ 99.9% en poids
  - Taux de récupération en cyclohexane en pied de colonne : 99.99%

On cherche également à minimiser la consommation énergétique par des récupérations entre les courants à réchauffer et les courants à refroidir.

1.4. Constituants

Les constituants pris en considération dans la simulation sont extraits de la base standard livrée avec les logiciels ProSim. Ces constituants sont les suivants :

- ❖ Hydrogène
- ❖ Méthane
- ❖ Benzène
- ❖ Cyclohexane

1.5. Modèle thermodynamique

Compte tenu de la nature des constituants en présence, le modèle thermodynamique utilisé pour la représentation des équilibres entre phases et les calculs d'enthalpies est l'équation d'état cubique de Soave Redlich et Kwong (SRK) [2].

1.6. Conditions opératoires

- ✓ Alimentations du procédé

	Alimentation en benzène C01	*Alimentation en hydrogène C02*
Hydrogène (kmol/hr)	-	1383.83
Méthane (kmol/hr)	-	39.13
Benzène (kmol/hr)	370.44	-
Température (K)	311	311
Pression (atm)	37.735	37.735

- ✓ Compresseur K101

Paramètres de fonctionnement	*Valeur*
Rendement isentropique	0,75
Pression de refoulement (atm)	34

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France – Tous droits réservés

✓ Réacteur R101

Paramètres de fonctionnement	*Valeur*
Type de réacteur	simple
Taux de conversion du Benzène (%)	99,9
Perte de charge (atm)	1.02
Température de sortie (K)	497

✓ Colonne C101

Paramètres de fonctionnement	*Valeur*
Type de colonne	Colonne à distiller diphasique
Taux de reflux molaire	1
Débit de distillat vapeur (kmol/hr)	10,6
Taux molaire de récupération du cyclohexane au résidu (%)	99,9
Pression tête de colonne (atm)	15,6
Pertes de charge (atm)	0,4

Spécification complémentaire pour la colonne :

Spécification		*Type de produit*	*Constituant*	*Valeur*	*Phase*	*Type*	*Action*
1 :	Taux de récupération	Résidu liquide	Cyclohexane	0.9999	Liq.	Mol.	Débit du distillat vapeur

✓ Séparateur S101

Paramètres de fonctionnement	*Valeur*
Type de séparateur	Diphasique liquide-vapeur
Mode de fonctionnement	Adiabatique
Pression de fonctionnement (atm)	28,9

✓ Vanne V101

Paramètres de fonctionnement	*Valeur*
Type de vanne	Vanne de détente
Pression de sortie (atm)	19,7

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France – Tous droits réservés

✓ Vanne V102

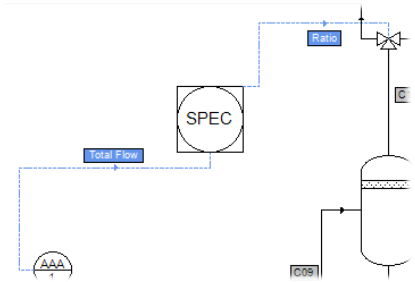
Paramètres de fonctionnement	*Valeur*	*Remarque*
Type de vanne	Vanne 3 voies	
Taux de partage pour le courant C12 (%)	95	Ce taux sera ajusté de manière à obtenir un débit molaire total égal à 5000 kmol/hr à l'entrée du réacteur R1011

✓ Échangeurs de chaleur

Nom	*Type*	*Température de sortie (K)*	*Perte de charge (atm)*
E101A	Consignateur de température	410	0.34
E101B	Simple échangeur	-	0.68
E102	Consignateur de température	422	0.34
E103	Consignateur de température	322	0.34
E104A	Consignateur de température	408	1.36
E104B	Simple échangeur	-	1.36
E105	Consignateur de température	322	0.68

1.7. "Trucs et astuces"

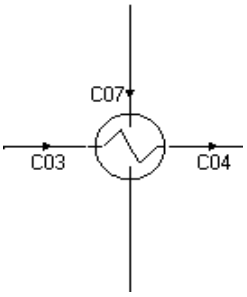
1.7.1. Module *Gestion des Contraintes*



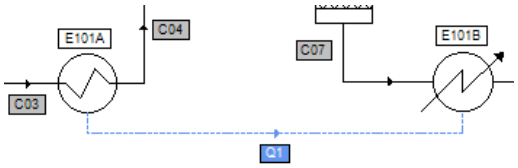
Ce module est utilisé afin d'obtenir le débit total souhaité pour le courant C06 en ajustant le ratio de la vanne de purge. On spécifie dans le module MESURE positionné sur le courant C06 la valeur souhaitée. Ce module mesure la valeur réelle du débit total et envoie l'écart entre la valeur souhaitée (consigne) et la valeur mesurée (mesure) par le courant d'information « Total Flow » au module de GESTION DES CONTRAINTES (SPEC). Le module de GESTION DES CONTRAINTES va alors ajuster la valeur du ratio pour satisfaire la contrainte spécifiée. Il s'occupe simultanément de gérer la convergence du recyclage.

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France – Tous droits réservés

1.7.2. Découplage échangeur de chaleur



est remplacé par



L'échangeur de chaleur à deux courants a été modélisé en deux parties. Cette astuce, fréquemment utilisée en simulation de procédés, permet d'éviter un courant de recyclage qui pénaliserait les calculs. On fixe la température de sortie du courant C03 à l'aide du consignateur de température qui calcule la quantité de chaleur à apporter pour satisfaire cette contrainte. Cette valeur est transmise par le courant d'information « Q1 » au module SIMPLE ECHANGEUR positionné sur le courant C07. Connaissant la température du courant C07 et la quantité de chaleur à apporter, il peut alors calculer la température de sortie de l'échangeur.

La même approche est utilisée pour modéliser l'intégration énergétique effectuée en préchauffant l'alimentation de la colonne de distillation avec le courant de résidu de cette dernière.

2. RÉSULTATS

2.1. Commentaires sur les résultats

La séquence de calcul (l'ordre de calcul des modules) est générée automatiquement. Au niveau du recyclage, aucun courant n'est initialisé et ProSimPlus choisit de faire converger le courant C13.

La convergence du cycle est obtenue en 3 itérations.

Le taux de partage au niveau de la vanne V102 vaut au final 91,3% de façon à satisfaire la contrainte d'un débit total de 5000 kmol/hr au niveau de l'entrée du réacteur R101.

Au niveau de la colonne de distillation, la convergence est obtenue en 16 itérations, sans aucune initialisation, ni de température ni de composition dans la colonne.

Deux paramètres de fonctionnement sont ajustés simultanément de façon à satisfaire la contrainte en taux de récupération et la contrainte en pureté du cyclohexane : le débit de reflux et le débit de distillat vapeur.

En fin de simulation le débit de distillat vapeur et le débit de reflux sont de 10,42 kmol/hr (taux de reflux de 1).

La quantité de chaleur à fournir au bouilleur est de 1,62 10^6 kcal/hr.

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France – Tous droits réservés

2.2. Bilans matière et énergie

Ce document ne présente que les bilans matière énergie sur les courants les plus pertinents. ProSimPlus fournit cependant des résultats complets sur tous les courants et au niveau des opérations unitaires.

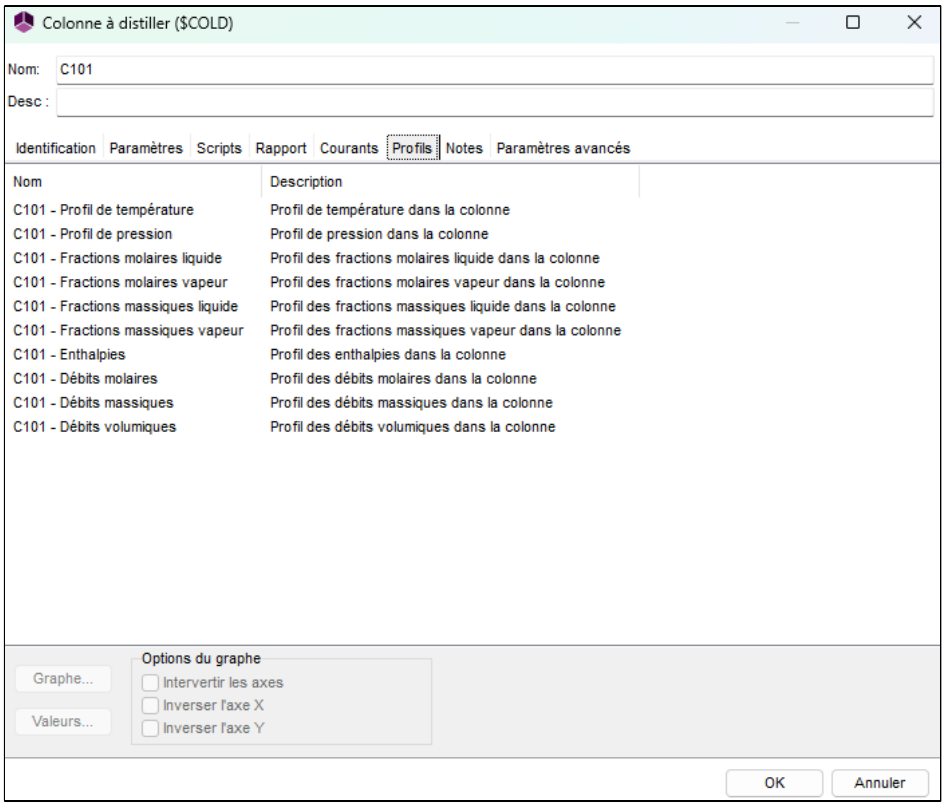
Courants		C01	C02	C06	C07	C13
De		Alim Benzène	Alim Hydrogène	MS01	R101	K101
Vers		M101	M101	R101	E101B	M101
Débits partiels		kg/h	kg/h	kg/h	kg/h	kg/h
HYDROGEN		0.0	2789.6	8415.3	6177.0	5625.6
METHANE		0.0	627.7	6554.4	6554.4	5926.6
BENZENE		28935.8	0.0	28939.1	28.9	3.3
CYCLOHEXANE		0.0	0.0	3910.6	35059.1	3910.6
Débit total	kg/h	28935.8	3417.4	47819.3	47819.3	15466.2
Fractions massiques						
HYDROGEN		0.000000	0.816309	0.175980	0.129173	0.363737
METHANE		0.000000	0.183691	0.137065	0.137065	0.383199
BENZENE		1.000000	0.000000	0.605175	0.000605	0.000214
CYCLOHEXANE		0.000000	0.000000	0.081779	0.733157	0.252850
Etat physique		Liquide	Vapeur	Vapeur	Vapeur	Vapeur
Température	K	311.00	311.00	422.00	497.00	340.65
Pression	atm	37.735	37.735	32.980	31.960	34.000
Flux enthalpique	kcal/h	-2792474.0	132169.9	5269459.6	7878904.2	997841.4
Fraction molaire vapeur		0.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000

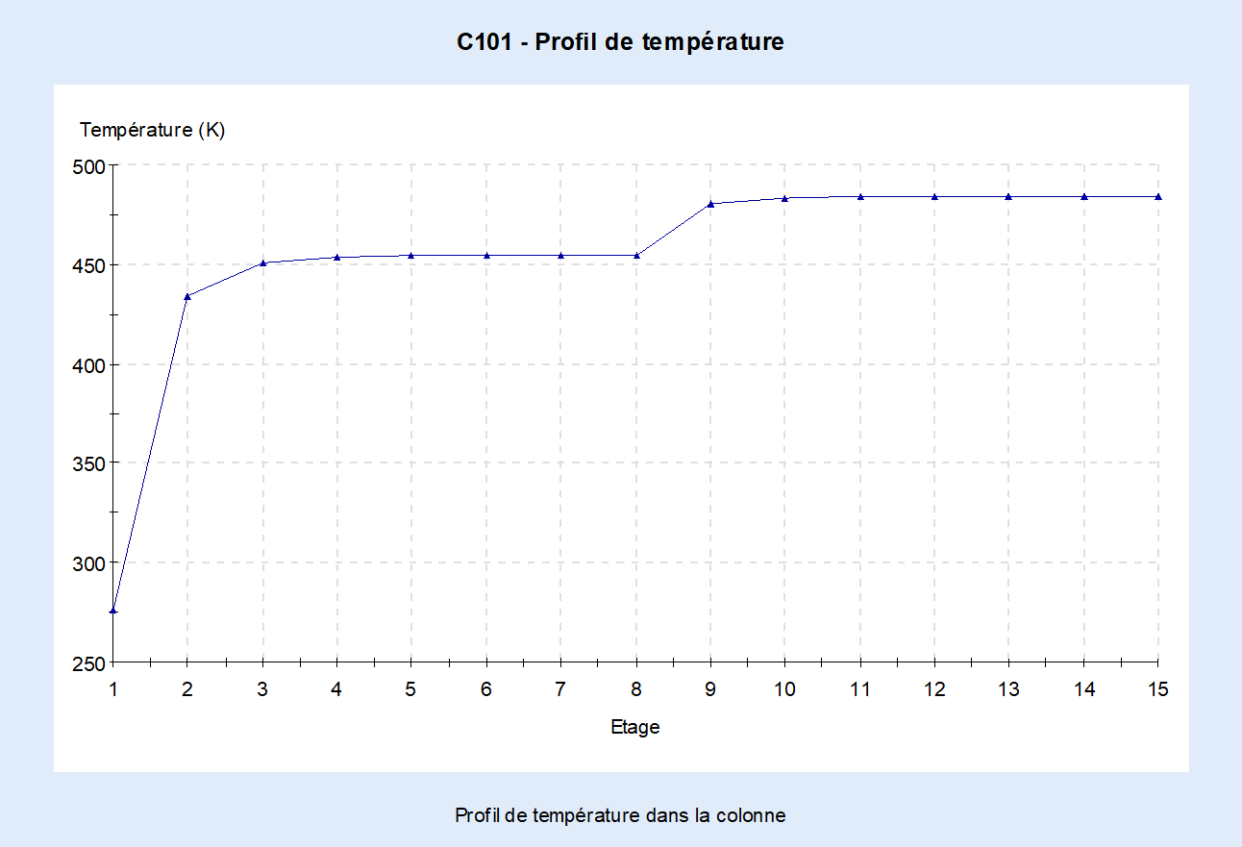
Courants		C16	C11	C17	C20
De		E104A	V102	C101	E105
Vers		C101	Sortie Procédé 3	Sortie Procédé 2	Sortie Procédé 1
Débits partiels		kg/h	kg/h	kg/h	kg/h
HYDROGEN		12.5	538.8	12.5	1.71E-07
METHANE		60.1	567.7	60.1	5.96E-05
BENZENE		25.3	0.3	0.0	25.3
CYCLOHEXANE		30773.9	374.6	3.1	30770.8
Débit total	kg/h	30871.8	1481.4	75.7	30796.1
Fractions massiques					
HYDROGEN		0.000405	0.363737	0.165245	0.000000
METHANE		0.001947	0.383198	0.794042	0.000000
BENZENE		0.000820	0.000214	0.000054	0.000822
CYCLOHEXANE		0.996828	0.252850	0.040658	0.999178
Etat physique		Liq./Vap.	Vapeur	Vapeur	Liquide
Température	K	408.00	321.58	276.53	322.00
Pression	atm	18.340	28.900	15.600	13.930
Flux enthalpique	kcal/h	-1162293.3	51564.4	-1788.0	-2527478.7
Fraction molaire vapeur		0.00811	1.00000	1.00000	0.00000

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France – Tous droits réservés

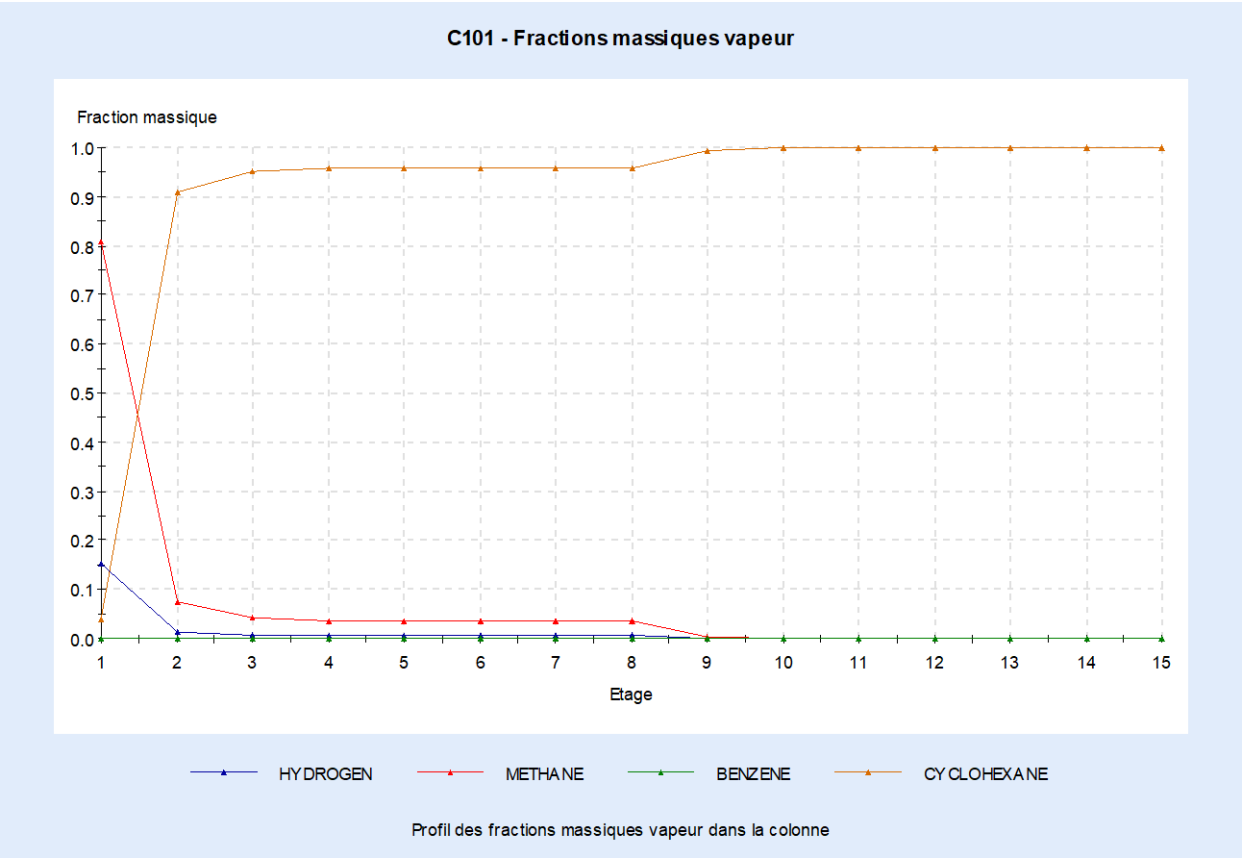
2.3. Profils dans la colonne C101

Les profils des colonnes sont accessibles depuis leur fenêtre de configuration (onglet « profils »). Un double-clic sur le profil choisi permet de générer le graphique.





Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France – Tous droits réservés



3. BIBLIOGRAPHIE

[1] Cyclohexane
ARCO Technology Inc.
Hydrocarbon Processing, November 1977, p 143

[2] Soave G.
"Equilibrium constants from a modified Redlich-Kwong equation of state"
C.E.S., 27, 6,1197-1203 (1972)

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France – Tous droits réservés