

EXEMPLE D'APPLICATION PROSIMPLUS

PROCEDE CLAUDE DE LIQUEFACTION DE L'HYDROGENE

INTERET DE L'EXEMPLE

Cet exemple détaille un procédé Claude pour la liquéfaction de l'hydrogène. Une méthode est présentée pour tenir compte de la réaction de conversion ortho-para de l'hydrogène au niveau de deux des échangeurs multi-fluides. Des critères comme la consommation spécifique d'énergie (SEC, Specific Energy Consumption) et l'efficacité exergetique des échangeurs multi-fluides sont calculées.

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

FICHIER PROSIMPLUS CORRESPONDANT	PSPS_EX_FR-Procédé-Claude-liquéfaction-hydrogène.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.

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	5
1.3.	Constituants	6
1.4.	Modèle thermodynamique.....	6
1.5.	Réaction chimique.....	7
1.6.	Conditions opératoires	7
1.6.1.	Alimentations	7
1.6.2.	Mélangeur.....	7
1.6.3.	Refroidisseur	7
1.6.4.	Compresseurs	8
1.6.5.	Echangeurs multi-fluides	9
1.6.6.	Réacteurs	10
1.6.7.	Détentes de Joule-Thomson	12
1.6.8.	Ballons de séparation.....	12
1.6.9.	Bilans exergétiques	12
1.6.10.	Méthode numérique	12
1.6.11.	Courants coupés	13
1.6.12.	Module utilisateur (script) : Efficiency Calculation.....	14
1.7.	« Trucs et astuces »	15
2.	RESULTATS DE LA SIMULATION	16
2.1.	Performance du procédé.....	16
2.2.	Echangeurs multi-fluides.....	17
3.	NOMENCLATURE	18
4.	BIBLIOGRAPHIE	19

1. MODELISATION DU PROCEDE

1.1. Présentation du procédé

L'hydrogène retient de plus en plus l'attention en tant que vecteur énergétique car son utilisation n'émet pas de gaz à effet de serre et il peut être utilisé pour stocker l'énergie renouvelable. Les centres de production d'électricité renouvelable les plus compétitifs, par exemple les parcs éoliens de la mer du Nord ou les parcs solaires du Moyen-Orient, sont loin des grands sites de production d'Europe. Par conséquent, des infrastructures d'approvisionnement doivent être développées pour transporter l'hydrogène sur de longues distances. Le principal obstacle est sa faible densité volumétrique, ce qui entraînerait des dimensions excessives des équipements de stockage et de transport. Pour augmenter la densité volumétrique, la liquéfaction est une option prometteuse pour la livraison à grande échelle. La liquéfaction de l'hydrogène se produit à environ 20 K à la pression atmosphérique. Il s'agit du processus le plus énergivore de la chaîne d'approvisionnement et, par conséquent, une attention particulière doit être accordée à sa conception [RES23].

Un procédé de liquéfaction de l'hydrogène classique comprend quatre étapes consécutives [OHL14] :

1. Pré-compression du gaz d'alimentation en hydrogène, si nécessaire.
2. Pré-refroidissement de l'hydrogène gazeux jusqu'à environ 80 K.
3. Refroidissement cryogénique de l'hydrogène gazeux jusqu'à 20-30 K, comprenant la conversion ortho-para de l'hydrogène.
4. Expansion finale et liquéfaction de l'hydrogène.

La plupart des technologies actuelles de liquéfaction de l'hydrogène sont caractérisées par la nature du cycle de réfrigération utilisé dans la section de réfrigération cryogénique. Dans les procédés de liquéfaction construits, ce cycle est basé soit sur un cycle de Brayton à l'hélium, soit sur un cycle de Claude à hydrogène [CAR17a]. Un cycle de Brayton utilise une turbine au lieu d'une vanne à effet Joule-Thomson pour l'expansion. Le cycle de Claude classique est une combinaison d'un cycle de Joule-Thomson et du cycle de Brayton : un flux de réfrigérant est détendu dans des turbines tandis qu'un second flux est refroidi et détendu dans une vanne pour produire un flux diphasique [CAR17a]. La consommation spécifique d'énergie (SEC, Specific Energy Consumption) des trains de liquéfaction exploités aux États-Unis est estimée entre 12,5 et 15 kWh/kg_{LH2} pour des capacités comprises entre 5,4 et 32 t_{LH2}/d [CAR17b].

La simulation permet d'investiguer facilement les recyclages entre les échangeurs, leurs niveaux de température, l'utilisation de turbine ou de vanne, le constituant employé pour le refroidissement, etc. Afin de prendre en compte la réaction ortho-para de l'hydrogène dans un échangeur de chaleur multi-fluides non-réactif, une méthode est d'ajouter un réacteur en sortie du courant à liquéfier [RIA23]. Le réacteur peut être à taux de conversion donné, équilibré ou à minimisation de l'énergie libre de Gibbs [RIA23]. Pour la prise en compte de l'exothermicité de la réaction, le réacteur peut être adiabatique ou isotherme [RIA23]. Pour appliquer la chaleur de réaction calculée au niveau du réacteur dans l'échangeur de chaleur multi-fluides, il est possible de recycler le flux sortant du réacteur directement ou indirectement dans l'échangeur multi-fluides, puis de transmettre cette chaleur à un flux externe ou la répartir sous forme d'une perte thermique dans l'échangeur multi-fluides [RIA23]. Pour être en accord avec les hypothèses prises dans [RES23], cette simulation utilise deux réacteurs adiabatiques dont les taux de conversion sont calculés à partir de la constante d'équilibre de [WIL18]. Dans [RES23], les flux sortants des deux réacteurs ne sont pas traités de la

même manière : la simulation est construite en suivant cette même hypothèse (voir la description dans le paragraphe suivant).

Cet exemple est basé sur le procédé décrit dans [RES23]. Il porte sur la simulation d'un cycle Claude pré-refroidi à l'azote liquide. Le paragraphe 1.2 décrit le schéma de simulation. Deux des échangeurs, HX-2 et HX-3, sont des échangeurs réacteurs qui en plus de la liquéfaction de l'hydrogène assurent la conversion ortho-para de l'hydrogène. L'opération unitaire « échangeur de chaleur multi-fluides (MHX) » utilisée pour modéliser ces échangeurs ne gérant pas les réactions chimiques, la réaction de conversion ortho-para de l'hydrogène est prise en compte dans des réacteurs séparés. Afin de suivre l'hypothèse faite dans [RES23], leurs flux sortants sont recyclés dans les échangeurs HX-2 et HX-3 pour tenir compte de l'exothermicité de la réaction. Toujours pour suivre l'hypothèse faite dans [RES23], il est supposé que l'équilibre ortho-para est atteint (pas de déplacement de l'équilibre par utilisation d'un catalyseur). Pour aller plus loin l'exemple « COPROSEC_EX_FR-Conversion-ortho-para-hydrogène » permet de :

- ✓ Modéliser un échangeur réacteur à plaques et ailettes brasées comportant un catalyseur en lit fixe dans certains passages,
- ✓ Modéliser une réaction catalytique permettant d'accroître la conversion ortho-para de l'hydrogène.

L'hydrogène normal à liquéfier (25% de p-H₂ et 75% de o-H₂) entre dans le procédé via le flux 01 à une pression de 20 bars et à une température ambiante. Il est supposé ici exempt d'humidité et de gaz condensables. Ce flux est mélangé aux flux de recyclage 16 et 20 à haute teneur en p-H₂ pour former le flux 02, qui est refroidi à l'aide d'eau de procédé (la partie utilité n'est pas représentée dans cette simulation) puis comprimé à 103 bars dans le compresseur bi-étagé C-1 comportant deux refroidisseurs intermédiaires. Le flux de sortie de C-1, 04b, est refroidi dans les échangeurs de chaleur multi-fluides HX-1 et HX-2, à 64,8 K puis 46,9 K respectivement, en réchauffant les flux gazeux d'hydrogène recyclés à basse et moyenne pression. L'échangeur de chaleur HX-1 comprend un flux d'azote liquide à une pression de 1,1 bars. Les échangeurs de chaleur HX-1 et HX-2 sont caractérisés par une approche de température minimale de 2 K. Le flux d'hydrogène à liquéfier est envoyé au réacteur R-1. Le flux 06a à la sortie de R-1 est refroidi dans HX-2 avant de réduire sa pression à 5,5 bars dans la vanne de Joule-Thomson VLV-1. Le flux diphasique résultant est séparé dans le ballon V-1. La vapeur est recyclée pour refroidir le flux procédé dans HX-1 et HX-2. Le liquide passe à travers l'échangeur de chaleur procédé - procédé HX-3, qui se caractérise par une approche de température minimale de 1 K. Le flux 09 est envoyé vers le réacteur R-2, puis est refroidi en passant par la vanne de Joule-Thomson VLV-2, atteignant la pression de stockage de 1,3 bars. Le ballon V-2 sépare la vapeur, qui est recyclée en repassant sous forme de flux froid dans HX-3, HX-2 et HX-1, et le liquide, qui quitte le procédé pour être stocké dans un réservoir isolé à une pression de 1,3 bars. Par souci de simplicité, les pertes de charge à l'intérieur des échangeurs de chaleur sont négligées.

1.3. Constituants

Les constituants pris en compte dans la simulation ainsi que leurs formules chimiques et leurs numéros CAS¹ sont présentés dans le tableau ci-après. Les deux hydrogènes sont issus de la base de données « H2 » qui a été développée principalement pour la liquéfaction de l'hydrogène, et à partir de la base de données standard de ProSimPlus [ROW24]. Le constituant azote provient directement de la base de données standard de ProSimPlus [ROW24].

Constituant	Formule chimique	Notation	Numéro CAS ⁽¹⁾
HYDROGEN (para, isomers model)	H ₂	p-H ₂	55000-01-6
HYDROGEN (ortho, isomers model)	H ₂	o-H ₂	88000-01-5
NITROGEN	N ₂	N ₂	7727-37-9

L'hydrogène normal est également disponible dans la base de données « H2 ». Il est donc possible de bâtir la même simulation et d'obtenir des résultats analogues en utilisant un mélange d'hydrogène normal et d'hydrogène para. L'enthalpie de fusion et la pression de sublimation du o-H₂ sont manquantes pour ce constituant. Pour éviter un message d'avertissement dans le calcul exergétique, bien que ces propriétés ne soient pas utilisées, elles ont été prises égales à celles du p-H₂.

1.4. Modèle thermodynamique

Le profil thermodynamique « Hydrogène (isomères) » est utilisé dans les courants ne comportant que de l'hydrogène (p-H₂ et/ou o-H₂). Ce modèle permet de représenter les propriétés énergétiques et de transport de mélange contenant du n-H₂, du p-H₂ et du o-H₂ pour des températures comprises entre 20 K et 400 K et des pressions comprises entre 0,1 bar et 100 bars. L'équation d'état Redlich-Kwong [RED49] a été sélectionnée ainsi que la fonction alpha Twu-Nancy généralisée [LEG16]. Pour une bonne représentation des propriétés de transport (viscosité dynamique liquide et vapeur, et conductivité thermique liquide et vapeur) les paramètres des modèles de [ASS11], [MUZ13], [REI77] ont été ajustés sur des données expérimentales.

Le profil thermodynamique « PSRK » ([HOL91], [GME95], [CHE02]) est utilisé pour les courants ne comportant que de l'azote.

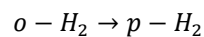
Chaque profil thermodynamique est défini avec son calculator thermodynamique dédié : « Hydrogen isomers » et « PSRK ».

¹ CAS Registry Numbers® are the intellectual property of the American Chemical Society and are used by Fives ProSim SAS with the express permission of ACS. CAS Registry Numbers® have not been verified by ACS and may be inaccurate.

1.5. Réaction chimique

La réaction de conversion ortho-para de l'hydrogène est prise en compte de manière très simple car le taux de conversion entre le p-H₂ et le o-H₂ sera calculé via un script directement dans les modules réactifs dédiés. Cette réaction est associée au calculator « Hydrogen isomers ».

La réaction est décrite comme étant une réaction instantanée dont la chaleur de réaction est calculée.



1.6. Conditions opératoires

1.6.1. Alimentations

L'alimentation « Feed nH2 » est l'alimentation en hydrogène normal qui sera liquéfié et converti au maximum en hydrogène para. L'alimentation « Feed LN2 » est l'alimentation en azote liquide qui constitue l'appoint froid d'un des échangeurs.

	Feed nH2	Feed LN2
Fractions molaires		
p-H ₂	0.25	0
o-H ₂	0.75	0
N ₂	0	1
Débit (kg/h)	1 798.8	28 500
Température (K)	298.15	Température de bulle
Pression (bar)	20	1.1

1.6.2. Mélangeur

Le mélangeur « Stream mixer » est un mélangeur adiabatique à la pression la plus faible des alimentations.

1.6.3. Refroidisseur

Le refroidisseur « Cooler » est représenté par une opération unitaire « consigne de température » dont la température de sortie est fixée à 308,15 K. Aucune perte de charge n'est spécifiée.

1.6.4. Compresseurs

Le compresseur « C-1 » est un compresseur bi-étagé avec refroidisseur intermédiaire. Afin de permettre l'utilisation du module « Exergy balance », ce compresseur est représenté par différentes opérations unitaires.

Compresseur	C-1 - 1st stage	C-1 - 2nd stage
Opération unitaire	Compresseur	
Modélisation	1 ^{er} étage de compression	2 nd étage de compression
Pression de refoulement (bar)	45.3872	103
Rendement isentropique	0.8	
Rendement mécanique	1	
Rendement électrique	1	

Refroidisseur intermédiaire	Cooler - 1st stage	Cooler - 2nd stage
Opération unitaire	Consignateur de température	
Modélisation	Refroidisseur entre étage	Refroidisseur de sortie
Température (K)	308.15	

Les compresseurs « C-2 » et « C-3 » sont des compresseurs mono-étagés représentés par des opérations unitaires « Compresseur ».

Compresseur	C-2	C-3
Pression de refoulement (bar)	20	
Rendement isentropique	0.8	
Rendement mécanique	1	
Rendement électrique	1	

1.6.5. Echangeurs multi-fluides

Les trois échangeurs multi-fluides sont représentés par des opérations unitaires « échangeur de chaleur multi-fluides (MHX) ». Les paramètres autres que ceux figurant dans les tableaux suivants ont leurs valeurs par défaut.

Echangeur HX-1		
Courant entrant	Courant sortant	Spécification
04d	05	Température de sortie = 64.8 K
18	19	Pas de spécification Type d'initialisation : Température = 280 K
14	15	
21	22	

Echangeur HX-2		
Courant entrant	Courant sortant	Spécification
17	18	Pas de spécification Type d'initialisation : Température = 55 K
13	14	Température de sortie = 62.8 K
05	06	Température de sortie = 46.855 K
06a	06b	

Echangeur HX-3		
Courant entrant	Courant sortant	Spécification
12	13	Delta T (sortie - entrée de référence) = -1 K Courant de référence : « 08 »
08	09	Pas de spécification Type d'initialisation : Température = 293.15 K



Spécification « Pas de spécification »

Cette spécification indique qu'il n'y a pas de contrainte sur la valeur de la température de sortie du courant. Celle-ci sera calculée pour satisfaire le bilan enthalpique sur l'échangeur. Si plusieurs courants de sortie sont non spécifiés, leurs températures seront égales.

1.6.6. Réacteurs

Les réacteurs R-1 et R-2 permettent de représenter la réaction de conversion ortho-para de l'hydrogène dans les passages réactifs des échangeurs multi-fluides HX-2 et HX -3, respectivement. Ce sont des opérations unitaires « Réacteur simple ». Leurs taux de conversion seront calculés à partir de la formulation de [WIL18] donnant la composition à l'équilibre entre p-H₂ et o-H₂.

$$x_{p-H_2}^{eq} = \frac{0,1}{\exp\left(\frac{-5,313}{T/T_c}\right) + 0,1} - 2,52 \times 10^{-4} \left(\frac{T}{T_c}\right)^3 + 3,71 \times 10^{-3} \left(\frac{T}{T_c}\right)^2 - 2,04 \times 10^{-3} \frac{T}{T_c} - 0,00227$$

$$\tau_{p-H_2} = \frac{x_{p-H_2}^{eq} - x_{p-H_2,in}}{1 - x_{p-H_2,in}}$$

	R-1	R-2
Fonctionnement thermique	Adiabatique	
Pression	La plus faible des alimentations	
Taux de conversion (initialisation)	0.191132	0.885364
Constituant clé	o-H ₂	

Le script de calcul, commun aux deux réacteurs, est présenté ci-dessous.

```

Sub OnCalculationStart()

'-----'
' RECOVERY OF THE INLET STREAM DATA'
'-----'
TK_in   = Module.InputStream(1).Temperature      'K
QpH2_in = Module.InputStream(1).PartialMolarFlowrate(1) 'kmol/hr
Qtot_in = Module.InputStream(1).MolarFlowrate    'kmol/hr

'-----'
' CALCULATION OF THE INLET p-H2 MOLAR FRACTION'
'-----'
xpH2_in = QpH2_in/Qtot_in

'-----'
' CALCULATION OF THE EQUILIBRIUM CONSTANT'
' WILHELMSSEN ET AL., REDUCING THE EXERGY DESTRUCTION IN THE CRYOGENIC HEAT'
' EXCHANGERS OF H2 LIQUEFACTION PROCESSES'
' INTER. J. HYDROGEN ENERGY, 43(10), 5033-5047 (2018)'
'-----'

'-----'
' CALCULATION OF THE REDUCED TEMPERATURE'
'-----'
Tcrit = 32.937      'K critical temperature from Wilhelmsen
Tr      = TK_in/Tcrit

'-----'
' CALCULATION OF THE OUTLET p-H2 MOLAR FRACTION'
'-----'
xpH2_out = 0.1/(exp(-5.313/Tr) + 0.1) - 2.52e-4*Tr^3 + 3.71e-3*Tr^2 - 2.04e-3*Tr - 0.00227

'-----'
' CALCULATION OF THE CONVERSION RATIO'
'-----'
ConvRatio = (xpH2_out - xPH2_in)/(1. - xPH2_in)

'-----'
' AFFECTATION OF THE VALUE'
'-----'
Module.ConversionRatios(1) = ConvRatio

End Sub

```

1.6.7. Détentes de Joule-Thomson

Les détentes de Joule-Thomson sont représentées par des opérations unitaires « Vanne de détente ».

	VLV-1	VLV-2
Type de contrainte	Spécification de la pression	
Pression (bar)	5.5	1.3

1.6.8. Ballons de séparation

Les ballons de séparation V-1 et V-2 sont représentés par des opérations unitaires « Séparateur liquide-vapeur (flash diphasique) ». Ils sont adiabatiques à la pression la plus faible des alimentations.

1.6.9. Bilans exergetiques

Tous les paramètres restent par défaut, excepté le critère de convergence pour les calculs d'exergie primaire qui est augmenté à 10^{-4} . Cette dégradation de la convergence ne sera que peu sensible pour l'évaluation de l'exergie des échangeurs multi-fluides.

1.6.10. Méthode numérique

Afin d'obtenir la convergence de la simulation le plus rapidement possible, la méthode numérique est modifiée. Pour cela, un module « Gestion des contraintes et recyclages » est ajouté dans la simulation. Seuls les paramètres suivants sont modifiés :

- ✓ Méthodes numériques : Broyden
- ✓ Opérateur d'accélération : Matrice Jacobienne par différences finies

De manière optionnelle, pour avoir accès aux informations relatives à ce module, il est nécessaire de sélectionner les courants coupés via le bouton correspondant de ce module : 04d, 05, 06, 06b et 09.

1.6.11. Courants coupés

La résolution de cette simulation nécessite 5 courants coupés. Leurs initialisations sont présentées dans le tableau ci-dessous.

Courants	04d	05	06	06b	09
Fractions molaires					
p-H ₂	0.71				
o-H ₂	0.29				
N ₂	0				
Débit (kg/h)	20 383				4 174
Température (K)	308.15	64.8	45.8		25.7
Pression (bar)	103				5.5

1.6.12. Module utilisateur (script) : Efficiency Calculation

La consommation spécifique d'énergie est définie comme le rapport des puissances utiles totales des compresseurs sur le débit d'hydrogène liquéfié produit, comme illustré par la relation ci-dessous :

$$SEC = \frac{\sum_i^{stages} P_{tot,i}}{F_{H_2,liq}}$$

Le script suivant permet de calculer cette consommation électrique spécifique des compresseurs du procédé et de les convertir en unité du rapport.

```
'-----'
' CALL OF PREDEFINED SCRIPT
'-----'

ExecuteGlobal CreateObject("Scripting.FileSystemObject").OpenTextFile(Project.ApplicationPath &
"Scripts\IncludeScript.vbs", 1).ReadAll()
IncludeScript "UnitConversion.vbs"

function OnCalculation()
    Name1 = "C-1 - 1st stage"
    Name2 = "C-1 - 2nd stage"
    Name3 = "C-2"
    Name4 = "C-3"
    Outlet = "11"

'-----'
' CALCULATION OF THE SPECIFIC ELECTRICITY CONSUMPTIONS OF THE COMPRESSORS
'-----'

Module.Parameter(1) = ProSimToReport("Mass enthalpy",
Project.Modules(Name1).TotalUsefulPower/Project.Streams(Outlet).MassFlowRate)
Module.Parameter(2) = ProSimToReport("Mass enthalpy",
Project.Modules(Name2).TotalUsefulPower/Project.Streams(Outlet).MassFlowRate)
Module.Parameter(3) = ProSimToReport("Mass enthalpy", (Project.Modules(Name1).TotalUsefulPower
+ Project.Modules(Name2).TotalUsefulPower)/Project.Streams(Outlet).MassFlowRate)
Module.Parameter(4) = ProSimToReport("Mass enthalpy",
Project.Modules(Name3).TotalUsefulPower/Project.Streams(Outlet).MassFlowRate)
Module.Parameter(5) = ProSimToReport("Mass enthalpy",
Project.Modules(Name4).TotalUsefulPower/Project.Streams(Outlet).MassFlowRate)
sum = 0
For i = 1 to 3
    sum = sum + Module.Parameter(i+2)
Next
Module.Parameter(6) = sum

OnCalculation = True

end function
```

1.7. « Trucs et astuces »

Des « Tags » sont utilisés pour afficher, sur le schéma de procédé, les fractions molaires en p-H₂ en sortie des échangeurs multi-fluides HX-1, HX-2 et HX-3, les efficacités exergetiques de ces mêmes échangeurs et la consommation spécifique d'énergie des compresseurs C-1, C-2 et C-3.

Le mode expert des tags permet de coder en VBS le formatage de la valeur ainsi que de faire apparaître l'unité du rapport (voir par exemple ci-dessous pour le compresseur C-2).

The screenshot shows the 'Tag' dialog box with the 'Expert' mode selected. The 'Valeur' tab is active, and the 'Mode expert' radio button is chosen. The 'Expert' section is expanded, showing the 'Paramètres de l'opération unitaire utilisables dans le script'. The 'Opération unitaire' and 'Paramètre' dropdowns are empty. The 'Syntaxe' section shows a VBS script for formatting the tag value. The 'Texte de début' field contains 'C-2 :'. The 'Texte de fin' field is empty. The 'Format pour valeurs numériques' dropdown is set to '###0.00'. The 'Aperçu' field shows the result: 'C-2 : 1,39 kWh/kg'. The 'OK' and 'Annuler' buttons are at the bottom right.

Tag

Valeur Graphiques

☐ Mode standard ☒ Mode expert

Expert

Paramètres de l'opération unitaire utilisables dans le script

Opération unitaire :

Paramètre :

Syntaxe :

Coller Info Plus

```
1 ExecuteGlobal CreateObject("Scripting.FileSystemObject").OpenTextFile(Project.ApplicationPath & "Scripts\IncludeScript.vbs", 1).ReadAll()
2 IncludeScript "UnitConversion.vbs"
3 IncludeScript "FormatDouble.vbs"
4 function ExpertTag()
5     ExpertTag = FormatDouble(project.modules("Efficiency Calculation").Parameter(4),0,3) & " " & ReportUnit("Mass enthalpy")
6
7 end function
```

Texte de début : C-2 :

Texte de fin :

Format pour valeurs numériques : ###0.00

Aperçu: C-2 : 1,39 kWh/kg

OK Annuler

2. RESULTATS DE LA SIMULATION

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

2.1. Performance du procédé

Le tableau ci-dessous résume quelques performances du procédé.

Débit d'hydrogène liquéfié (kg/h)	1 798.8
Température de sortie de l'hydrogène liquéfié (K)	21.1
Fraction molaire en p-H ₂ (mol./mol.)	0.99

Le tableau suivant présente la consommation spécifique d'énergie de chaque compresseur ainsi que la totale.

	Consommation spécifique d'énergie (kWh/kg _{LH2})
Compresseur C-1	9.48
Compresseur C-2	1.39
Compresseur C-3	6.37
Total	17.24

Le tableau suivant présente l'efficacité exergétique des trois échangeurs multi-fluides. Une analyse exergétique complète est détaillée dans l'exemple « PSPS_EX_FR-Procédé-PRICO-liquéfaction-gaz-naturel ».

	Efficacité exergétique (%)
Echangeur HX-1	82.96
Echangeur HX-2	67.54
Echangeur HX-3	87.12

Les valeurs obtenues sont cohérentes avec celles de [RES23]. Les écarts peuvent s'expliquer par les écarts entre le modèle thermodynamique utilisé dans cet exemple et celui de [RES23].

2.2. Echangeurs multi-fluides

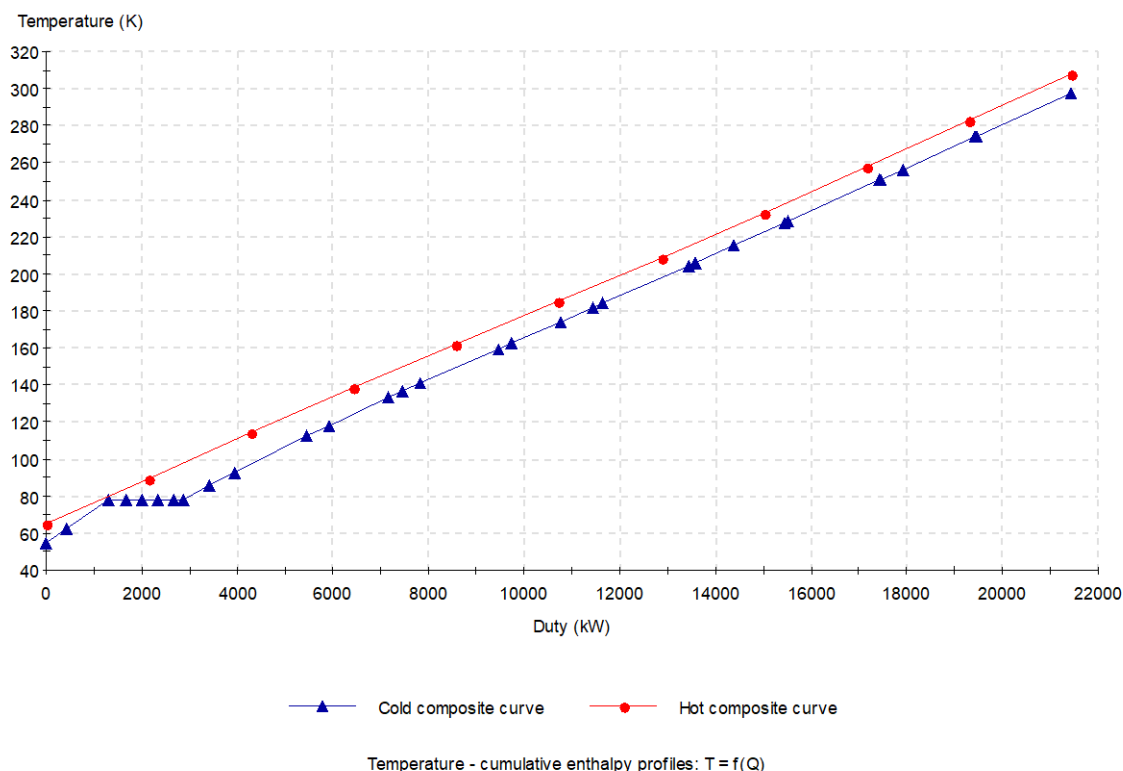
Le tableau suivant présente les pincements de chacun des 3 échangeurs multi-fluides.

	Pincement (K)
Echangeur HX-1	2.05
Echangeur HX-2	2.00
Echangeur HX-3	1.00

Un débit de 28 500 kg/h d'azote liquide à sa température de bulle à 1,1 bar est nécessaire pour atteindre le pincement de 2 K dans l'échangeur multi-fluide HX-1.

Les courbes composées froides et chaudes sont disponibles pour chaque échangeur multi-fluides. Elles sont construites à partir des courbes enthalpiques des courants froids et chauds. Le principe de construction des courbes composées et de calcul de l'échangeur multi-fluides sont fondés sur la méthode du pincement (voir l'exemple « PSPS_EX_FR-Procédé-PRICO-liquéfaction-gaz-naturel »). La figure ci-dessous montre les courbes obtenues pour l'échangeur multi-fluides HX-1.

HX-1 - Hot and cold composite curves



3. NOMENCLATURE

$F_{H_2,liq}$	Débit d'hydrogène liquéfié produit	kg/h
i	Compteur des boucles	(-)
LH_2	Hydrogène liquéfié	(-)
$P_{tot,i}$	Puissance utile totale à l'étage i de compression	kW
SEC	Consommation spécifique d'énergie	kWh/kg _{LH2}
$stages$	Nombre d'étages de compression	(-)
T	Température	K
T_c	Température critique du p-H ₂	K
$x_{p-H_2,in}$	Fraction molaire en p-H ₂ en entrée du réacteur	mol./mol.
$x_{p-H_2}^{eq}$	Fraction molaire en p-H ₂ à l'équilibre	mol./mol.
τ_{p-H_2}	Taux de conversion du p-H ₂	mol./mol.

4. BIBLIOGRAPHIE

- [ASS11] ASSAEL, M. J., ASSAEL, J. -A. M., HUBER, M. L., PERKINS, R. A., TAKATA, Y., "Correlation of the Thermal Conductivity of Normal and Parahydrogen from the Triple Point to 1000K and up to 100 MPa", J. Phys. Chem. Ref. Data, 40, (2011)
- [CAR17a] CARDELLA U., DECKER L., SUNDBERG J., KLEIN H., "Process Optimization for Large-Scale Hydrogen Liquefaction", Int. J. Hydrogen Energy, 42, 12339-12354 (2017)
- [CAR17b] CARDELLA U., DECKER L., KLEIN H., "Roadmap to Economically Viable Hydrogen Liquefaction", Int. J. Hydrogen Energy, 42, 13329-13338 (2017)
- [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)
- [LEG16] LE GUENNEC Y., PRIVAT R., JAUBERT J.N., "Development of the Translated-Consistent tc-PR and tc-RK Cubic Equations of State for a Safe and Accurate Prediction of Volumetric, Energetic and Saturation Properties of Pure Compounds in the Sub and Super-Critical Domains", Fluid Phase Equilib., 429, 301-312 (2106)
- [MUZ13] MUZNY, C. D., HUBER, M. L., KAZAKOV F., "Correlation for the viscosity of Normal Hydrogen Obtained from Symbolic Regression", J. Chem. Eng. Data, 58, 969-979 (2013)
- [OHL14] OHLIG K., DECKER L., "The Latest Developments and Outlook for Hydrogen Liquefaction Technology", Adv. Cryogenic Eng., AIP Conf. Proc., 1573, 1311-1317 (2014)
- [RED49] REDLICH O., KWONG I.N.S., "On the Thermodynamics of Solutions; an Equation of State; Fugacities of Gaseous Solutions", Chem. Rev., 44, 233-244 (1949)
- [REI77] REID R.C., J.M. PRAUSNITZ, B.E. POLING, "The properties of gases and liquids", Fourth ed., Mc Graw Hill Book Company, New York (1977)
- [RES23] RESTELLI F., SPATOLISANO E., PELLEGRINI L.A., "Hydrogen Liquefaction: A Systematic Approach to its Thermodynamic Modeling", Chem. Eng. Trans., 99, 433-438 (2023)
- [RIA23] RIAZ A., QYYUM M.A., HUSSAIN A., LEE M., "Significance of ortho-para Hydrogen Conversion in the Performance of Hydrogen Liquefaction Process", Int. J. Hydrogen Energy, 48, 26568-26582 (2023)
- [ROW24] 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 (2024).

- [WIL18] WILHELMSSEN Ø., BERSTAD D., AASEN A., NEKSA P., SKAUGEN G., "Reducing the Exergy Destruction in the Cryogenic Heat Exchangers of Hydrogen Liquefaction Processes", Int. J. Hydrogen Energy, 43, 5033-5047 (2018)