



وزارة البحث العلمي والتعليم العالي

MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPEREUR ET DE LA
RECHERCHE SCIENTIFIQUE

جامعة عبد الحميد بن باديس مستغانم

Université Abdelhamid Ibn Badis Mostaganem

كلية العلوم و التكنولوجيا

Faculté des Sciences et de la Technologie

DEPARTEMENT DE GENIE DES PROCEDES



N° d'ordre : M...../IP/2019

MEMOIRE DE FIN D'ETUDES DE MASTER ACADEMIQUE

Filière : Industries pétrochimiques

Option: Génie pétrochimique

Thème

**Simulation du procédé de production du gaz de synthèses par
vaporemformage du méthane**

Présenté par

MANENO Albertino Alberto

MINRAGE Júnior Sebastião Muasse

Soutenu le 09/07/2019 devant le jury composé de :

Présidente : Dr ATTOUTI Salima Maître de conférences B Université de Mostaganem
Examinatrice : Dr BESSAHA Fatiha Maître de conférences A Université de Mostaganem
Rapporteur : BENMEKKI Fadila Maître assistante A Université de Mostaganem

Année Universitaire 2018/2019

R **EMERCIEMENTS**

Nous remercions tout d'abord le Dieu tout puissant pour ces bienfaits inestimables, de nous avoir illuminés vers l'apprentissage.

À notre professeur **M^{me} BENMEKKI Fadila**

Nous sommes très sensibles à l'honneur que vous nous faites en acceptant d'encadrer notre travail.

On vous exprime notre grande admiration pour vos hautes qualités morales, humaines et professionnelles. On vous prie de trouver, dans ce modeste travail, l'expression de notre sincère reconnaissance et notre respectueuse admiration.

On remercie aussi le membre du jury, Dr **ATTOUTI Salima** et Dr **BESSAHA Fatiha**.

Une pensée très sincère à tous les enseignants de la faculté des sciences et de la technologie en particulier à ceux du département de génie des procédés qui ont su nous donner une formation didactique et appréciable tout au long de notre cursus universitaire.

A nos parents, merci de nous avoir inculqués des vraies valeurs et de nous avoir permis de devenir les personnes que nous sommes aujourd'hui. On vous exprime notre gratitude.

A nos frères, sœurs et amis on tient à vous remercier pour votre contribution inconditionnelle pour notre succès, vous incarnez la douceur, l'amour, la gentillesse et la bienveillance.

A tous ceux qu'on aime

C'est avec un grand honneur que nous exprimons nos sincères gratitudee.

MERCI POUR VOTRE SOUTIEN ET VOTRE ENCOURAGEMENT

D

EDICACES

À ceux qui nous sont les plus chers

À ceux qui ont toujours cru en nous

À ceux qui nous ont toujours encouragés

C'est avec grande joie que nous dédions ce travail à nos chères amies, frères et sœurs du cœur à l'ensemble de nos familles.

Nos chers parents, nous vous offrons ce modeste travail pour vous remercier pour vos tous sacrifices. Aucune dédicace ne saurait exprimer nos sentiments à votre sujet.

Nous voilà arrivés à la fin d'un long et difficile parcours. Vous êtes plus que des amies, une famille uni et courageuse. Vous étiez toujours présents pour nous soutenir, nous écouter et nous gâter, vous nous avez beaucoup aidé, on vous en sera toujours reconnaissants. On vous aime bien et on vous dédie ce modeste travail.

À tous nos enseignants et professeurs

Du primaire, passant par le collège, le lycée et enfin nous voilà à la faculté des Sciences et de la Technologie Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem en Algérie.

Liste des Abréviations

ATR : Reformage autotherme
CO: Monoxyde de carbone
NO : Monoxyde de l'azote
CO₂ : Dioxyde de carbone
HCl : Acide chloridrique
THT : Tétrahydrothiophène
Zn : Zinc
H₂S : Sulfure d'hydrogène
CoO : Monoxyde de cobalt
MoO₃ : Trioxyde de molybdène
NiO: Monoxyde de nickel
CoMo : Cobalt-Molybdène
NiMo : Nickel-Molybdène
Kg : Kilogramme
CuO : Monoxyde de cuivre
ZnO : Monoxyde de zinc
MPa : Mega pascal
C₂ et C₃ : Éthane et Propane
SMR : Reformage du méthane à la vapeur.
ΔH_{760°C} : Enthalpie à la température 760 °C
MgO : Monoxyde de magnésium
CaO : Monoxyde de calcium
GPL : Gaz de pétrole liquéfié
WGS : Changement du gaz de l'eau.
PSA : Adsorption par inversion de pression

Liste des Tableaux

| | |
|---|----|
| Tableau III.1 : Spécifications des réactions de conversion..... | 24 |
| Tableau III.2 : Compositions et paramètres des courants de matière du « Reformer » | 27 |
| Tableau III.3 : Spécification de l'opération « Set 1 » | 28 |
| Tableau III.4 : Spécification de l'opération « Set 2 » | 28 |
| Tableau III.5 : Spécification de l'opération « Set 3 » | 28 |
| Tableau III.6 : Spécification du réacteur de vaporeformage « Reformer » | 29 |
| Tableau III.7 : Débits molaires (lbmol/hr) des composés des courants d'entrée-sortie du réacteur de vaporeformage « Reformer » | 30 |
| Tableau III.8 : Le réacteur de combustion « Combustor » | 30 |
| Tableau III.9 : Débits molaires (lbmol/hr) des composés des courants d'entrée-sortie du réacteur de combustion « Combustor » | 31 |
| Tableau III.10 : Le réacteur d'équilibre « Combustor Shift » | 31 |
| Tableau III.11 : Le réacteur d'équilibre « Shift Reactor 1 » | 32 |
| Tableau III.12 : Le réacteur d'équilibre « Shift Reactor 2 » | 32 |
| Tableau III.13 : Débits molaires (lbmol/hr) des composés des courants d'entrée-sortie des réacteurs « Shift Reactors » | 33 |
| Tableau III.14 : Opération Adjaust « ADJ-1 » | 33 |
| Tableau III.15 : Opération Adjaust « ADJ-2 » | 34 |

Titre des Figures

| | |
|---|----|
| Figure I.1: Production d'hydrogène de méthanol et d'ammoniac à partir de gaz naturel..... | 4 |
| Figure I.2: Schéma de principe d'une désulfuration finale..... | 7 |
| Figure I.3: Composition molaire du gaz naturel..... | 9 |
| Figure I.4: Production d'hydrogène par vaporeformage..... | 10 |
| Figure II.1: Barre d'outils de « Aspen HYSYS »..... | 19 |
| Figure III.1 : Liste des composés chimiques de la simulation..... | 22 |
| Figure III.2 : Choix du modèle thermodynamique | 24 |
| Figure III.3 : L'ajout d'une réaction de conversion « Rxn-1 » | 26 |
| Figure III.4 : L'ajout d'une réaction d'équilibre « Rxn-4 » | 26 |
| Figure III.5 : Attachement de l'ensemble des réactions « Combustor Rxn set » au réacteur « Combustor » | 27 |
| Figure III.6 : Spreadsheet | 34 |
| Figure III.7 : Le PFD final du procédé « Synthesis Gas Production » | 36 |
| Figure III.8 : Variation de la fraction molaire des composés dans les courants de sortie de chaque réacteur | 37 |
| Figure III.9. Variation des débits molaires des composés dans les courants de sortie de chaque réacteur | 37 |
| Figure III.10. La variation de la température dans les courants de sortie de chaque réacteur. | 38 |

Table des matières

| | |
|--|----|
| <u>INTRODUCTION GÉNÉRALE</u> | 1 |
| Chapitre I : La production d gaz de synthèse par vaporeformage du méthane | 2 |
| <u>I.1. Introduction</u> | 2 |
| <u>I.2. Généralités sur la production du gaz de synthèse</u> | 2 |
| <u>I.3. Présentation et Contexte</u> | 3 |
| <u>I.4. Procédé de vaporeformage</u> | 5 |
| I.4.1. Charges | 5 |
| I.4.2. Prétraitement des charges | 6 |
| I.4.3 Hydrogénation..... | 7 |
| I.4.4. Fixation du sulfure du dihydrogène..... | 8 |
| I.4.5. Mise en œuvre industrielle..... | 9 |
| <u>I.5. Gaz naturel</u> | 9 |
| <u>I.6. Purification du gaz de synthèse</u> | 10 |
| <u>I.7. Reformage</u> | 10 |
| I.7.1. Procédé conventionnel de reformage à la vapeur | 10 |
| <u>I.8. Thermodynamique et cinétique des réactions</u> | 11 |
| I.8.1. Principales réactions observées..... | 11 |
| <u>I.9. Catalyseurs de reformage</u> | 12 |
| I.9.1. Types de catalyseurs..... | 12 |
| I.9.2. Dépôt de carbone..... | 13 |
| I.9.3.Empoisonnement des catalyseurs..... | 14 |
| <u>I.10. Utilisation du gaz de synthèse</u> | 14 |
| Chapitre II : Le simulateur Aspen HYSYS | 16 |
| <u>II.1. Introduction</u> | 16 |
| <u>II.2. Rôle de la simulation</u> | 16 |
| <u>II.3. Type de simulation</u> | 17 |
| <u>II.4. Utilisation de la simulation</u> | 17 |
| <u>II.5. Présentation du simulateur « Aspen HYSYS »</u> | 18 |
| II.5.1. Environnements de «Aspen HYSYS »..... | 18 |
| II.5.2. Caractéristiques principales de « Aspen HYSYS » | 19 |
| II.5.3. Les modèles thermodynamiques dans « Aspen HYSYS »..... | 20 |

| | |
|--|-----------|
| Chapitre III : Simulation du procédé de production du gaz de synthèse par vaporeformage du méthane..... | 22 |
| <u>III.1 Introduction</u> | 22 |
| <u>III.2. Description du procédé sur Aspen HYSYS</u> | 22 |
| <u>III.2.1. Introduction des composés du procédé</u> | 22 |
| <u>III.2.2 Choix du modèle thermodynamique « Fluid Package »</u> | 22 |
| <u>III.2.3 Définition des réactions</u> | 24 |
| <u>III.2.4. Addition des « Set Rxn »</u> | 26 |
| <u>III.2.5. Introduction des courants de matières « Streams »</u> | 27 |
| <u>III.2.6. Installation des «Set Operations»</u> | 27 |
| <u>III.2.7. Installation des réacteurs</u> | 29 |
| III.2.7.1. Le réacteur « Reformer » | 29 |
| III.2.7.2 Le réacteur « Combustor » | 30 |
| III.2.7.3. Les réacteurs d'équilibre « Shift reactors »..... | 31 |
| <u>III.2.8. Introduction des « Adjusts »</u> | 33 |
| <u>III.2.9. Installation du Spreadsheet</u> | 34 |
| <u>III.2.10. Process Flow Diagram (PFD) finale</u> | 35 |
| <u>III.3. Interprétation des Résultats Obtenus</u> | 37 |
| <u>Conclusion Générale</u>..... | 39 |
| Références bibliographiques | |
| Annexes | |

Résumé

Dans ce travail, la simulation du procédé de production du gaz de synthèse est effectuée en utilisant le logiciel «**ASPEN HYSYS V 7.3**». Les gaz de synthèse s'appliquent à des mélanges gazeux susceptibles de se combiner pour réaliser la synthèse de composés organiques ou celle de l'ammoniac, constitués des quatre éléments les plus répandus dans la nature (le carbone, l'oxygène, l'hydrogène et l'azote), l'hydrogène est le composant essentiel du gaz de synthèse et l'azote est indispensable à la synthèse de l'ammoniac, mais serait inerte dans le cas des synthèses de produits organiques. Le gaz de synthèse contient principalement de la vapeur d'eau, de l'hydrogène, du méthane, du monoxyde de carbone et un peu de dioxyde de carbone. Les matières premières les plus légères font l'objet d'une conversion catalytique, utilisant la vapeur d'eau comme oxydant, appelée vaporeformage. Les différentes opérations de production et de traitement entourant ce procédé englobent des étapes de purification et une étape de conversion du monoxyde de carbone dans le cas de l'hydrogène. Le gaz de synthèse est combustible et souvent utilisé comme carburant de moteurs à combustion interne.

Mots clés : Gaz de synthèse, Méthane, Aspen HYSYS.

Abstract

In this work, the simulation of a synthesis gas production process is carried out using the "ASPEN HYSYS V 7.3" software. Synthesis gases are applied to gaseous mixtures capable of combining to produce the synthesis of organic compounds or that of ammonia, consisting of the four elements most common in nature (carbon, oxygen, hydrogen and nitrogen), hydrogen is the essential component of synthesis gas and nitrogen is essential for the synthesis of ammonia, but would be inert in the case of syntheses of organic products. The synthesis gas contains mainly water vapor, hydrogen, methane, carbon monoxide and a little carbon dioxide. The lightest raw materials undergo a catalytic conversion, using water vapor as an oxidant, called steam reforming. The various production and processing operations surrounding this process include purification steps and a conversion step of carbon monoxide in the case of hydrogen. Synthesis gas is combustible and often used as fuel for internal combustion engines.

Key words: Synthesis gas, Methane, Aspen HYSYS.

INTRODUCTION GÉNÉRALE

Ce travail aborde la production d'hydrogène à partir de charges légères par vaporeformage, le terme gaz de synthèse peut prêter à une interprétation très vaste. En réalité, il est d'usage de considérer qu'il s'applique à des mélanges gazeux susceptibles de se combiner pour réaliser la synthèse de composés organiques ou celle de l'ammoniac. On trouve systématiquement, dans le gaz de synthèse, deux ou plusieurs, combinés ou non, des quatre éléments les plus répons dans la nature : le carbone, l'oxygène, l'hydrogène et l'azote. L'oxygène est pratiquement toujours combiné au carbone sous forme de monoxyde ou dioxyde de carbone. L'hydrogène est le composant essentiel du gaz de synthèse. L'azote est indispensable à la synthèse de l'ammoniac, mais serait inerte dans le cas des synthèses de produits organiques. Les hydrocarbures (gaz naturel ou plus rarement coupes pétrolières) sont la source principale de gaz de synthèse. Les matières premières les plus légères font l'objet d'une conversion catalytique, utilisant la vapeur d'eau comme oxydant, appelée vaporeformage. Les charges plus lourdes (résidus pétroliers, charbon, biomasse) font l'objet d'une conversion à l'oxygène appelé oxydation partielle ou gazéification.

Notre travail a comme objet d'obtenir le gaz de synthèse à partir du gaz naturel par vaporeformage du méthane. Nous nous servons pour cela du logiciel «Aspen HYSYS» parce qu'il est le principal logiciel d'Aspen Tech orienté pour le génie des procédés. «Aspen HYSYS» est un outil de modélisation, de conception, d'optimisation et de suivi des performances de la plupart des procédés industriels.

Ce manuscrit s'articule autour de trois chapitres de la manière suivante :

Une introduction générale est consacrée à la notion sur l'importance du sujet abordé en exposant l'objectif visé.

Premier chapitre est consacré à la compréhension du procédé de production du gaz de synthèse par vaporeformage du méthane.

Deuxième chapitre est consacré générale sur la simulation et particulièrement sur le logiciel utilisé « Aspen HYSYS V 7.3 ».

Troisième chapitre est consacré sur les étapes essentiels pour réaliser la simulation du procédé ainsi que les résultats générés par celle-ci sont analysés et interprétés.

Finalement des conclusions sont tirées et quelques perspectives sont proposées.

Chapitre I

Production du gaz de synthèses par
vaporeformage du méthane

I.1. Introduction

Le gaz de synthèse ou autrefois nommé «le gaz manufacturé» est un mélange gazeux combustible produit par pyrolyse. C'est un gaz pauvre (deux fois moins énergétique que le gaz naturel), sale, toxique, acide corrosif s'il n'a pas été soigneusement épuré. Il est issu d'une réaction chimique complexe, cette réaction est caractérisée par une première étape de gazéification par pyrolyse d'une matière organique (bois ou charbon), en présence d'un agent oxydant volontairement introduit en quantité insuffisante, assez pour qu'il y ait combustion, mais trop peu pour qu'elle soit complète. Cette réaction produit un gaz formé d'un mélange de gaz condensables et incondensables, sorte de charbon du bois résiduel ; le gaz de synthèse commercialisé est produit par une seconde phase de décomposition thermique.^[1]

I.2. Généralités sur la production du gaz de synthèse

Parmi les autres procédés de production du gaz de synthèse « **syngas** », nous pouvons citer : l'oxydation partielle, la gazéification et le reformage autotherme (ATR). Ces procédés utilisent comme charges les résidus pétroliers, le charbon ou la biomasse. Le choix d'un procédé de production du « **syngas** » est fonction du rapport H_2/CO souhaité à la sortie du réacteur, de la pureté des produits, de la capacité de l'installation, de la disponibilité de la ressource et du coût. Le reformage à la vapeur ou vaporeformage des hydrocarbures (spécialement le méthane) est actuellement le procédé le plus utilisé pour la production du «syngas». Il est basé sur une conversion catalytique utilisant la vapeur d'eau comme oxydant pour convertir le gaz naturel mais aussi les gaz combustibles de raffinerie, les gaz de pétrole liquéfiés (propane, butane) ou le naphta léger. Dans ce procédé, le méthane réagit avec la vapeur d'eau pour produire un mélange d'hydrogène, de monoxyde de carbone et de dioxyde de carbone. Pour obtenir une vitesse de réaction acceptable, un catalyseur est nécessaire pour accélérer la réaction. Le catalyseur doit être assez stable sous les conditions dans lesquelles une conversion élevée du méthane peut être atteinte c'est-à-dire une température élevée et une forte probabilité de réactions secondaires indésirables pouvant mener à un dépôt de carbone. Le procédé de reformage à la vapeur du méthane est avantageux puisqu'il ne nécessite pas d'oxygène, permet d'avoir un rapport H_2/CO élevé et est aujourd'hui bien maîtrisé.^[2]

Les principaux inconvénients de ce procédé sont :

- La nécessité d'éliminer le soufre contenu dans le gaz alimentant le réacteur pour éviter l'empoisonnement des catalyseurs.
- L'importante émission de gaz polluants comme les NO_x .
- La possibilité de formation de carbone sur le catalyseur qui entraîne une baisse de la productivité et la dégradation des performances du réacteur.

Dans la transition vers les énergies renouvelables, l'hydrogène jouera un rôle clé comme «vecteur d'énergie». Actuellement, il est plus économique de le produire à partir de combustible fossile comme le gaz naturel en utilisant le procédé de vaporeformage.

I.3. Présentation et Contexte

Dans la fabrication du gaz de synthèse, on opère donc la transformation de C et/ou C_nH_m en CO , CO_2 , H_2 avec parfois addition de N_2 , l'oxygène étant apporté soit directement, soit par la vapeur d'eau ou l'air. En termes d'utilisation du gaz de synthèse, on distingue essentiellement:

- ✚ L'hydrogène purifié qui est le composant essentiel de toutes les réactions d'hydrogénation;
- ✚ Le mélange $\text{CO} + \text{CO}_2 + \text{H}_2$ qui est à l'origine de la synthèse du méthanol ;
- ✚ Le monoxyde de carbone seul qui conduit aux réactions de carbonatation ;
- ✚ Le mélange $\text{CO} + \text{H}_2$ qui est la base des synthèses **Oxo** (procédé principalement utilisé pour produire des aldéhydes à partir des alcènes dans un intervalle de $\text{C}_3 - \text{C}_{18}$ et des synthèses Fischer-Tropsch (procédé qui fait intervenir la catalyse de monoxyde de carbone et d'hydrogène en vue de les convertir en hydrocarbure).

L'hydrogène et l'azote, débarrassés de tous les composés oxygénés, qui permettent la synthèse de l'ammoniac, base essentielle de la chimie de l'acide nitrique et des engrais azotés. L'objet du présent travail est l'étude des différentes opérations de production et de traitement des gaz de synthèse par la voie du **reformage**, sachant toutefois que certaines unités de ce traitement s'appliquent aussi aux installations produisant du gaz de synthèse par oxydation partielle de fuel lourd ou par gazéification de charbon. C'est le cas des unités de conversion et de décarbonatation. Les trois schémas de la figure 1 présentent de manière synthétique les chaînes de production d'hydrogène, de méthanol et d'ammoniac à partir de gaz naturel.

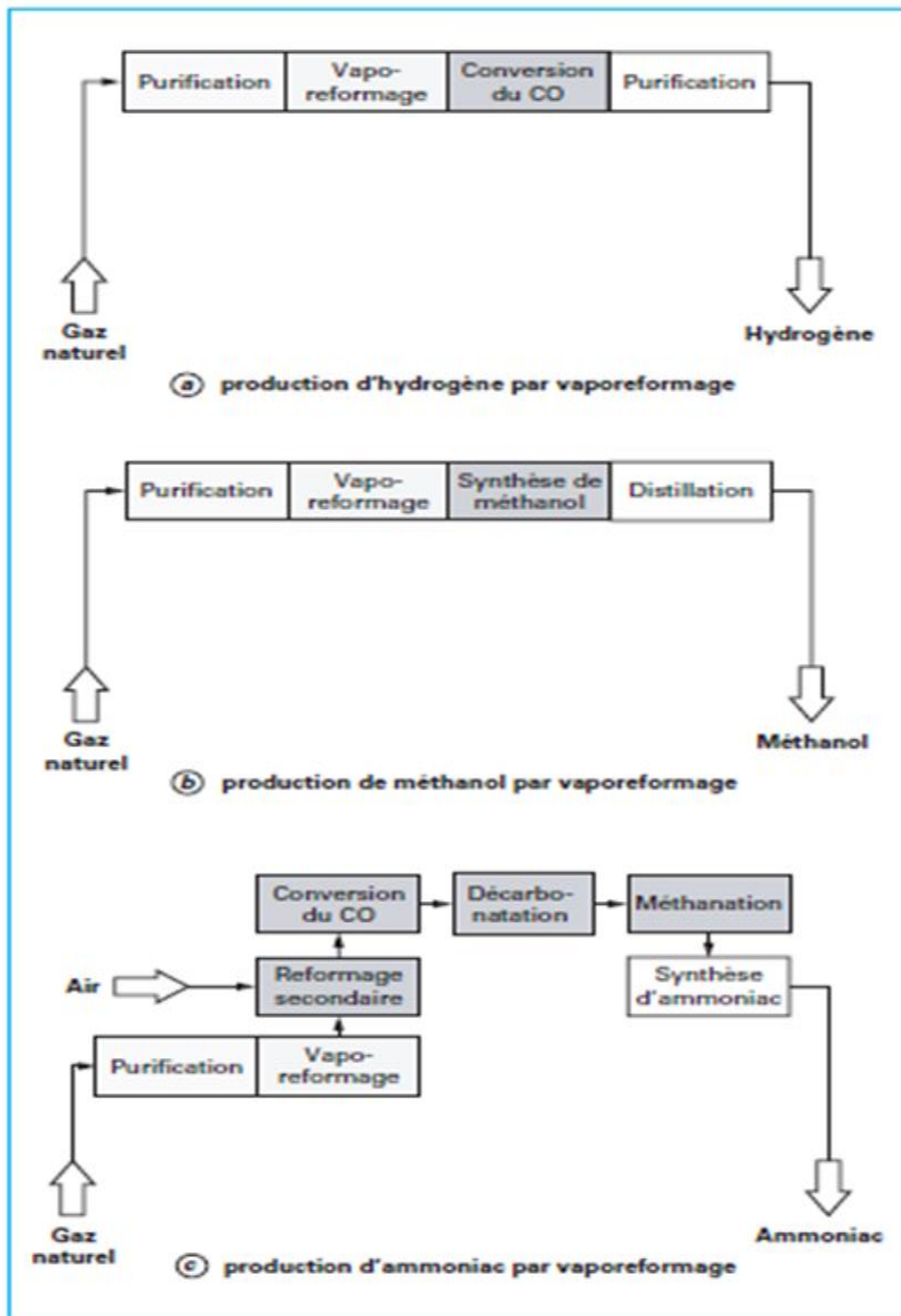


Figure I.1. Production d'hydrogène de méthanol et d'ammoniac à partir de gaz naturel

Les développements récents des unités de production et de conversion de gaz de synthèse ont essentiellement porté sur l'augmentation des capacités unitaires. Le développement de nouvelles générations de catalyseurs, de métallurgies (en particulier pour les tubes catalytiques des fours de vaporeformage) et l'introduction de technologies telles que le reformage secondaire à l'oxygène a facilité cette tendance à l'augmentation des capacités unitaires.

Dans l'état actuel de la technologie, de nouveaux accroissements des capacités unitaires sont envisageables dans un avenir proche en utilisant des technologies telles que le reformage autotherme (reformage à l'oxygène ou à l'air combiné avec un reformage à la vapeur d'eau). Cette technologie permettra de s'affranchir du four de vaporeformage qui est dans la majorité des cas l'étape limitante, ainsi que le principal poste d'investissement.

Outre l'augmentation des tailles d'unités, trois tendances devraient orienter le développement des unités de production de gaz de synthèse :

- ✚ Le développement de solutions conduisant à des consommations spécifiques plus faibles, du fait du renchérissement croissant des coûts des matières premières;
- ✚ Le recours croissant à des matières premières telles que les résidus pétroliers (résidus, coke de pétrole) et le charbon, voire à la biomasse pour des unités de production de taille modeste;
- ✚ La réduction de l'impact environnemental des unités, avec, en particulier le développement de solutions permettant le captage du dioxyde de carbone à des fins de stockage géologique.^[2]

I.4. Procédé de vaporeformage

I.4.1. Charges

Le vaporeformage s'adresse à des charges légères, principalement du **gaz naturel**, mais aussi du gaz combustible de raffinerie, du gaz de pétrole liquéfié (propane, butane) ou du naphtha léger. Les charges les plus lourdes nécessitent de préférence un préreformage. Ces charges doivent être exemptes d'impuretés pouvant désactiver les catalyseurs utilisés, principalement le soufre, qui doit être en quantité très faible dans la charge (quelques **ppm**) et est éliminé totalement dans le prétraitement incorporé à l'unité de vaporeformage.

Les teneurs en impuretés des gaz sont exprimées en partie par million (ppm), soit 10^{-6} , en volume (sauf indications contraires).

Au cas où la charge contient une quantité plus importante de soufre, il convient de la traiter avant de l'envoyer au vaporeformage, par exemple par un traitement aux amines, ou bien pour du naphta par une hydrogénation catalytique. Les composés chlorés sont également un poison des catalyseurs mis en œuvre, ils sont transformés en acide chlorhydrique (HCl) par l'hydrogénation du prétraitement, qui doit également alors comporter des masses adsorbants spécifiques pour éliminer le HCl.

I.4.2. Prétraitement des charges

La désulfuration finale est l'élimination presque totale du soufre de la charge qui alimente un four de reformage à partir d'une charge à faible teneur en soufre : la teneur résiduelle maximale admissible en soufre est de 0,1 ppm vol. Les composés soufrés présents dans le gaz sont généralement :

- ✚ Le sulfure du dihydrogène H₂S;
- ✚ Mercaptans légers R-SH, tels que le méthyl mercaptan, l'éthylmercaptan;
- ✚ Le sulfure de carbonyle COS, notamment lorsque le gaz contient des oxydes de carbone.

Les gaz distribués par les réseaux nationaux contiennent souvent des traceurs odorants tels que le tétrahydro thiophène (THT), à raison de 1 à 5 ppm vol. Les naphtas, outre les composés précédemment cités, contiennent des sulfures, composés plus lourds du type R-S-R'. L'élimination complète du soufre se fait par combinaison irréversible du **sulfure du dihydrogène** avec de l'oxyde **de zinc** selon la réaction :



Une des premières étapes de la désulfuration est donc la transformation de tous les composés du soufre en H₂S par hydrogénation catalytique.

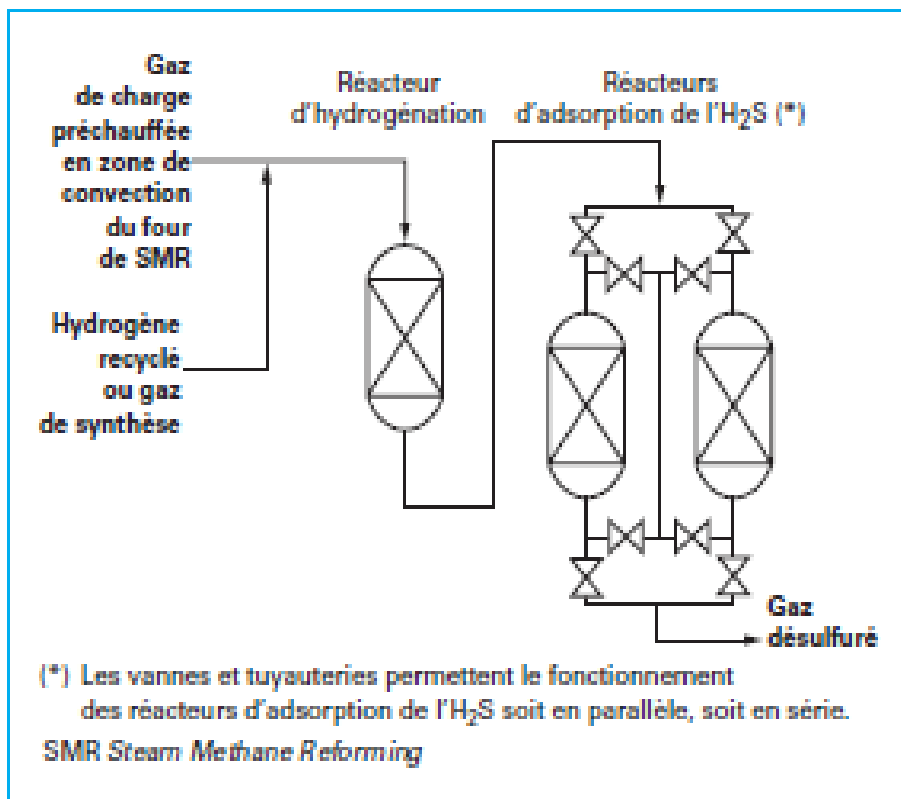


Figure I.2. Schéma du principe d'une désulfuration finale

La désulfuration finale est constituée le plus souvent d'un premier réacteur d'hydrogénation, suivi de deux réacteurs d'adsorption de H_2S (**Figure I.2** la configuration la plus fréquente).

I.4.3 Hydrogénation

Les composés du soufre (COS, mercaptans, THT) sont transformés en H_2S par réaction avec l'hydrogène mélangé au gaz à traiter. La réaction s'effectue à environ 350 à 400°C, en présence de catalyseur d'hydrogénation. La teneur en hydrogène dans le gaz est de 2 à 5 % en volume, cet hydrogène est généralement obtenu par recyclage d'un peu du gaz de synthèse produit. Les catalyseurs mis en œuvre sont utilisés pour hydrogéner à la fois les composés du soufre, de l'oxygène, de l'azote et des hydrocarbures insaturés. Ils contiennent tous du molybdène et soit du cobalt soit du nickel, le support étant de l'alumine. Les catalyseurs sont fournis à l'état oxydé.

Le catalyseur cobalt-molybdène CoMo contient de 4 à 5 % en masse de CoO et de 10 à 13 % en masse de MoO₃, le catalyseur nickel-molybdène NiMo environ 3 % de NiO et de 5 à 9 % de MoO₃. Sous forme oxydée, ils présentent déjà une certaine activité pour l'hydrogénation. Cependant, leur activité est fortement accrue par la fixation du soufre ; c'est pourquoi, il est d'usage de présulfurer le catalyseur. Il faut en outre noter que la présence de quantités significatives (> 1% vol.) de CO et CO₂ accompagnant l'hydrogène recyclé peut conduire à des réactions de méthanisation et ainsi provoquer une forte élévation de température et la détérioration du catalyseur. Le choix entre catalyseurs Co-Mo ou Ni-Mo dépend de la nature de la charge à traiter. Les catalyseurs contenant du cobalt ont une activité supérieure à celle des catalyseurs contenant du nickel. Lorsque le gaz ou l'hydrogène recyclé contient des oxydes de carbone qui peuvent causer une baisse d'activité temporaire des catalyseurs d'hydrodésulfuration, les catalyseurs contenant du nickel sont recommandés, à cause de leur faible sensibilité aux oxydes de carbone. La durée de vie attendue de ces catalyseurs est de 10 ans environ.

I.4.4. Fixation du sulfure du dihydrogène

Elle se faisait autrefois par adsorption et nous citerons pour mémoire le charbon actif (additionné d'un promoteur chimique:CuO). Ce charbon actif n'avait qu'une faible capacité d'adsorption ; aussi va-t-il été remplacé presque partout par l'oxyde de zinc avec une hydrogénation préalable du gaz. La réaction de fixation du H₂S peut s'effectuer à des températures comprises entre 200 et 400°C. La teneur en soufre à saturation dépend de la température et peut atteindre 20 à 35 kg pour 100 kg de ZnO. Les absorbants commerciaux se composent aujourd'hui de plus de 90 % en masse de ZnO. La teneur en soufre du gaz et la durée de vie escomptée définit la quantité de ZnO mise en oeuvre. De trop fortes teneurs en soufre conduiraient à des volumes trop importants. On estime de ne pas traiter, dans ce genre d'installation, des gaz contenant plus de 100 ppm volume de soufre.

Exemple

Pour un atelier d'ammoniac de 2000 t/jour utilisant environ 55000 Nm³/h de gaz contenant 30 mg de soufre par Nm³ de gaz, la quantité d'oxyde de zinc mise en oeuvre pour une durée de vie de 1 an est de 35m³ environ.

I.4.5. Mise en œuvre industrielle

La mise en œuvre des catalyseurs d'hydrogénation et du réactif d'absorption du H_2S est assez simple. Le catalyseur est disposé en un ou deux lits dans des réacteurs cylindriques verticaux.

Compte tenu des conditions de température et de la pression partielle d'hydrogène, les réacteurs d'hydrogénation et d'absorption sont généralement construits en acier légèrement allié contenant 1,25 % en masse de chrome et 0,5 % en masse de molybdène.

Deux réacteurs d'adsorption à l'oxyde de zinc (**Figure I.2**) sont généralement installés en série, le second assurant ainsi une garde à soufre complémentaire, mais peuvent également être utilisés en parallèle. En situation normale, les températures optimales vont de 350 à 400°C. Il est recommandé de ne pas utiliser une température plus élevée que nécessaire. Les pressions opératoires vont couramment de 20 à 45 bars (2 à 4,5 MPa). Il est nécessaire de veiller à ce qu'il y ait toujours un excès d'hydrogène recyclé.^[2]

I.5. Gaz naturel

Le gaz naturel est un combustible fossile, il s'agit d'un mélange d'hydrocarbures trouvé naturellement sous forme gazeuse. C'est la deuxième source d'énergie la plus utilisée dans le monde après le pétrole et son usage s'est développé rapidement. Il est constitué essentiellement de CH_4 et on peut trouver aussi des hydrocarbures plus lourds que le CH_4 (de C_2 à C_5), il peut contenir du CO_2 , N_2 et He (voir la Figure I.3). Le GN du gisement de Hassi R'mel étant un gaz propre (ne contient pas de COS , CS_2 et H_2S). Le mercure est présent dans le gaz naturel mais avec des quantités de l'ordre de nano gramme par Nm^3 .^[4]

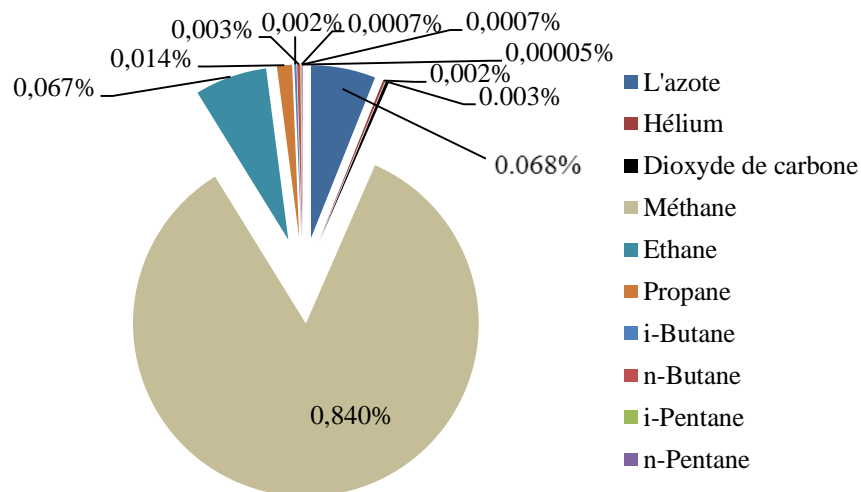


Figure I.3. Composition molaire du gaz naturel

I.6. Purification du gaz de synthèse

A la sortie du réacteur de shift, le gaz de synthèses produit contient 1 à 4 % de CO, et entre 16 à 20 % de CO₂. Il est nécessaire de rajouter une étape de purification pour obtenir de l'hydrogène pur. Les deux principales technologies de purification du gaz de synthèse sont le procédé PSA et la méthanisation. [3]

I.7. Reformage

Le procédé de reformage des hydrocarbures est apparu au début de ce siècle à l'occasion des études et recherches conduites par le Dr F. Bergius, puis développées en Allemagne à l'IG Farben (Société Allemande fondée le 1^{er} janvier 1925 sous le nom d'IG-Farben Industrie AG, destinée à la fabrication de produits chimiques et raffinage du pétrole) pour la fabrication de carburants de synthèse. Les premières unités industrielles de reformage d'hydrocarbures à la vapeur furent réalisées dès 1930 aux États-Unis par la Standard Oil Company of New Jersey. [2]

I.7.1. Procédé conventionnel de reformage à la vapeur

La production d'hydrogène à grande échelle par le reformage à la vapeur du gaz naturel nécessite différentes étapes catalytiques que sont : la désulfuration, le pré-reformage, le reformage primaire et le reformage secondaire, la réaction de Water Gas Shift (WGS) à haute et basse température et la purification de l'hydrogène. La réaction WGS contribue pour 15 % environ à la production totale d'hydrogène. La Figure I.4 présente les principales étapes du procédé. La production de gaz de synthèse nécessite seulement les étapes de désulfuration, de pré-reformage et de reformage. [3]

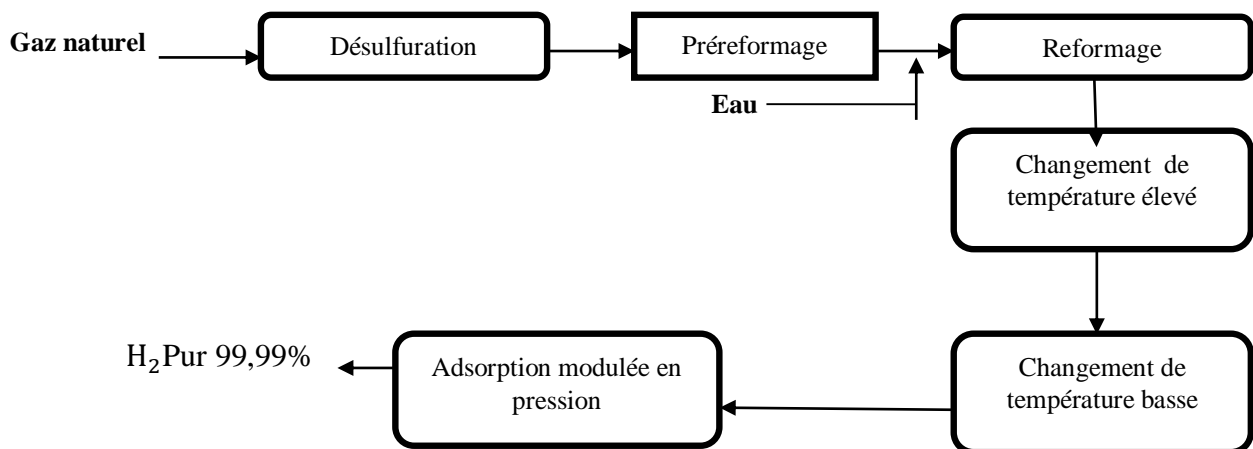


Figure 1.4 : Production d'hydrogène par vaporeformage

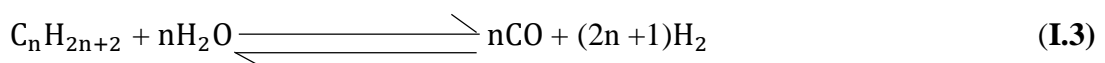
I.8. Thermodynamique et cinétique des réactions

I.8.1. Principales réactions observées

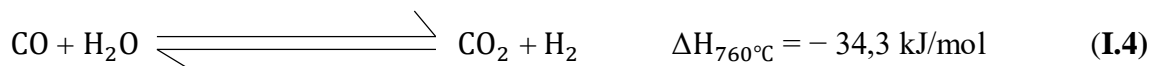
Le gaz naturel et les hydrocarbures légers après désulfuration sont transformés en gaz de synthèse par vaporeformage. Pour le méthane, constituant principal du gaz naturel, la réaction principale de reformage à la vapeur SMR (Stream Methane Reforming) correspond à l'oxydation catalytique suivante :



Cette équation se généralise aux hydrocarbures légers sous la forme :



La principale réaction secondaire est la conversion du monoxyde de carbone par la vapeur d'eau (Water gas shift) :



La réaction (I.2) est endothermique et thermodynamiquement équilibrée donc incomplète ; le nombre de moles formées par la réaction est supérieur à celui des réactifs. En conséquence, la réaction dans le sens direct est favorisée par un fonctionnement à faible pression et une forte température. La réaction (I.4) de conversion du monoxyde de carbone par la vapeur d'eau est, quant à elle, exothermique, équilibrée et équimolaire. Cela conduit à rechercher un fonctionnement à basse température pour favoriser la production d'hydrogène. Du fait du caractère équimolaire de la réaction, la pression a peu d'influence sur le niveau de réaction. En sortie de l'unité de reformage, le gaz de synthèse contient une teneur en CO relativement élevée.

Les réactions précédentes (I.2) et (I.4) sont favorisées par un fort excès de vapeur d'eau (rapport vapeur/carbone) mais cela pénalise le coût de fonctionnement de l'unité (besoins plus importants de génération puis de condensation de vapeur d'eau). Industriellement, la valeur minimale de ce rapport est choisie de manière à éviter les réactions parasites de formation de carbone et dépôt sur le catalyseur.^[2]

I.9. Catalyseurs de reformage

I.9.1. Types de catalyseurs

Les catalyseurs de vaporeformage d'hydrocarbures impliquent deux types de sites :

- ✚ Un site métallique pour adsorber et dissocier l'hydrocarbure ;
- ✚ Un site oxyde pour adsorber et dissocier l'eau.

Les catalyseurs de reformage de méthane ou de gaz naturel sont constitués d'oxyde de nickel déposé sur des supports réfractaires, qui sont, soit des aluminates de calcium, soit des oxydes de magnésium et/ou d'aluminium. MgO et CaO présentent un bon compromis entre une faible acidité qui réduit la formation de coke et une bonne stabilité thermique. Pour pallier à une résistance mécanique faible, ils sont combinés à de l'alumine sous la forme d'aluminates. Des précautions particulières doivent être prises dans le procédé pour éviter la formation d'hydrates de magnésium en présence d'eau à des températures inférieures à 500°C. Le rhodium est le métal le plus actif pour la réaction de vaporeformage, et bien que les métaux nobles soient plus résistants face au dépôt de carbone, la disponibilité et le faible coût du nickel en font le métal de choix pour les catalyseurs industriels. La dispersion des particules de nickel est de l'ordre du pourcent, avec une taille de particules comprise entre 20 et 200 nm. D'autres oxydes, difficiles à préparer avec une haute surface spécifique pour supporter les particules métalliques, sont ajoutés comme promoteurs. C'est le cas des oxydes d'uranium, de titane et de zirconium ou des oxydes de terres rares. Les catalyseurs utilisés pour le reformage des hydrocarbures plus lourds présentent des critères particuliers.

Afin de limiter au maximum les réactions d'hydrocraquage, il convient d'incorporer au catalyseur des substances alcalines par différents moyens, ce qui permet pour ces charges lourdes de limiter très efficacement le dépôt de carbone en catalysant la gazéification de ce dernier et autorise des fonctionnements d'unité à des ratios H_2O/C raisonnables.

Cependant, la volatilité des composés de potassium provoque leur perte continue, et leur migration dans l'unité est particulièrement préjudiciable pour les chaudières de récupération situées en aval des fours de reformage. La méthode d'introduction du potassium dans le catalyseur est critique afin de limiter au maximum ces pertes.

Différents types de catalyseurs sont donc actuellement disponibles sur le marché :

- ✚ Les catalyseurs pour le reformage de gaz naturel, ayant des teneurs en NiO de 10 à 18% en masse, avec support réfractaire à base d'alumine ou d'aluminate de calcium ou de magnésium ;
- ✚ Les catalyseurs résistants aux hautes températures pour le reformage de méthane et particulièrement le reformage secondaire contenant 3 à 6 % en masse de nickel sur des supports très réfractaires à base d'alumine ;
- ✚ Les catalyseurs de reformage des produits plus lourds (naphta), contenant de fortes teneurs massiques en nickel (8 à 35 %) sur support à base d'alumine et de magnésie, qui sont utilisés aussi en usage mixte gaz/naphta.

Les catalyseurs de reformage sont généralement présentés sous forme d'anneaux cylindriques (types anneaux Raschig ou anneaux pleins cannelés) de 16 mm de diamètre et 16 mm de hauteur environ. De nouvelles formes d'anneaux cylindriques cloisonnés ont été développées, offrant une plus grande surface spécifique et une perte de charge plus faible. L'objectif est de limiter les pertes en pression, de minimiser les limitations diffusionnelles et d'augmenter la conductivité thermique du matériau. Ils sont généralement fournis à l'état oxydé. Cependant, on trouve aussi des catalyseurs pré réduits, dont l'utilisation permet de diminuer la durée des premières mises en service des installations.

I.9.2. Dépôt de carbone

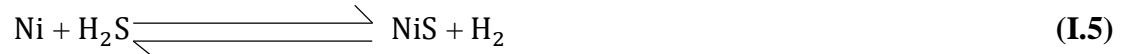
Le dépôt de carbone résulte du craquage des hydrocarbures et constitue un problème majeur des catalyseurs de vaporeformage, puisque le nickel a pour particularité de dissoudre les atomes de carbone qui n'évoluent pas vers des produits gazeux, formant par nucléation un carbone dit de whisker qui détruit mécaniquement les particules métalliques.

Pour restaurer l'activité du catalyseur, il faut brûler ce carbone par un traitement à la vapeur d'eau et à l'air. Une surveillance particulière de la température (qui ne doit pas dépasser 950°C) est nécessaire pendant cette opération pour ne pas détériorer le catalyseur, notamment par frittage des particules de nickel.

L'ajout de promoteurs alcalins permet de diminuer le dépôt de carbone, mais s'accompagne d'une diminution de l'activité en reformage du catalyseur. Dans certains cas, il est possible d'ajouter dans la charge des quantités contrôlées de soufre, qui se dépose sur le nickel et empêche la dissolution du carbone. Les teneurs en soufre doivent être limitées, car c'est l'un des principaux poisons du catalyseur.

I.9.3. Empoisonnement des catalyseurs

Le poison principal des catalyseurs de reformage est le soufre qui réagit directement avec le nickel selon la réaction totale :



Pour ne pas empoisonner le catalyseur, la teneur en soufre dans la charge est limitée à 0,1 ppm vol. Un catalyseur empoisonné par le soufre n'a pas d'activité au-dessous de 700°C. L'empoisonnement se traduit alors par la présence de zones où la température des tubes est plus élevée du fait de l'activité réduite du catalyseur empoisonné, et ce particulièrement dans la partie du lit catalytique au contact du gaz entrant, qui est la plus exposée à l'empoisonnement. Une autre conséquence directe est l'augmentation sensible de la teneur en méthane non converti. Comme déjà dit, il est donc absolument nécessaire de désulfurer soigneusement la charge d'hydrocarbure alimentant le four de reformage. Certains poisons, volatils, créent un empoisonnement temporaire : ce sont par exemple le chlore souvent présent dans la vapeur d'eau (problème de la pureté de l'eau de chaudière) et le brome (additif de certains hydrocarbures).

Ces poisons peuvent, après un certain temps de fonctionnement, être désorbés et migrés dans l'installation où ils sont alors très nuisibles pour d'autres catalyseurs tels que ceux de conversion du CO à basse température et pour les matériaux (aciers inoxydables). Les autres, non volatils, constituent des poisons permanents conduisant à la détérioration définitive du catalyseur : ce sont des composés tels que l'arsenic, le plomb et le vanadium provenant d'additifs des hydrocarbures.

I.10. Utilisation du gaz de synthèse

La quasi-totalité du gaz de synthèse produit dans le monde est purifié et/ou converti au sein même de l'unité de production pour obtenir le produit fini (hydrogène, ammoniac, méthanol, alcool oxo...). Il n'existe donc pas de marché du gaz de synthèse. Parmi les dérivés du gaz de synthèse, l'hydrogène représente un cas particulier. Cet hydrogène peut être produit au sein du complexe (typiquement à la raffinerie) au sein duquel il est consommé ; on parle dans ce cas de gaz « captif ». Il peut être également produit et vendu par une tierce société au consommateur final. On parle dans ce cas d'hydrogène « marchand ».

Les consommateurs principaux d'hydrogène sont les raffineries avec près de 50 % du marché, suivies par les unités de production d'ammoniac (près de 40 %), les unités de production de méthanol (dans ces derniers cas le chiffre prend en compte la fraction d'hydrogène contenue dans le gaz de synthèse), la chimie et la métallurgie. L'ammoniac sert essentiellement de base à la production d'urée et d'engrais. À noter qu'une part importante des besoins en hydrogène des raffineries est assurée par le coproduit des unités de reformage catalytique d'essence. Ce type d'unités augmente l'indice d'octane des essences en transformant catalytiquement les naphènes ou cyclo paraffines en composés aromatiques de même nombre d'atomes de carbone avec rejet simultané de 3 moles d'hydrogène.

Quant à la production d'ammoniac, sa croissance devrait être plus faible notamment en raison des modérations dans l'usage d'engrais azotés posant des problèmes de pollution par les nitrates en Europe de l'Ouest, tout en restant cependant tirée par les besoins croissants en engrais des pays tels que l'Inde.

En intégrant les coûts d'utilités (positifs et négatifs en raison de la coproduction de vapeur), le prix de revient de l'hydrogène est d'environ 1700 €/t avec comme hypothèses : 12 % de retour sur investissement et une durée d'amortissement de 15 ans. Dans ces coûts ne sont pas inclus les coûts de captage du CO₂ émis, sachant qu'environ 7 à 10 kg de CO₂/kg H₂ sont produits.

Exemple

À titre d'illustration, une unité de production d'hydrogène à partir du gaz naturel type d'une capacité de 100000 Nm³/h avec purification de l'hydrogène par PSA (pureté 99,9 % en volume, taux de récupération d'environ 90 %) représente un investissement d'environ 120 M€. Si la charge est du GPL ou du naphta, l'investissement est accru de + 5% et + 7% respectivement.^[2]

Chapitre II

Le Simulateur «**Aspen HYSYS**»

II.1. Introduction

La simulation est un outil utilisé dans différents domaines de l'ingénierie et de la recherche en général, permettant d'analyser le comportement d'un système avant de compléter et d'optimiser son fonctionnement, en testant différentes solutions et différentes conditions opératoires. Elle s'appuie sur l'élaboration d'un modèle du système et permet de réaliser des scénarios et d'en déduire le comportement du système physique analysé. Un modèle n'est pas une représentation exacte de la réalité physique, mais il est seulement apte à restituer les caractéristiques les plus importantes du système analysé.

Il existe plusieurs types de modèle d'un système physique : allant du modèle de représentation qui ne s'appuie que sur des relations mathématiques traduisant les grandes caractéristiques de son fonctionnement, jusqu'au modèle de connaissance complexe issu de l'écriture des lois physiques régissant les phénomènes mis en jeu. Le choix du type de modèle dépend principalement des objectifs poursuivis.^[6]

II.2. Rôle de la simulation

Le rôle de la simulation est d'améliorer la compréhension du processus pour permettre de prendre les meilleures décisions. Tout simulateur industriel de procédés chimiques est organisé autour des modules suivants :

- ✚ Des modules de calcul des différentes opérations unitaires contenant les équations relatives à leur fonctionnement : réacteur chimique, colonne de distillation, colonne de séparation, échangeurs de chaleur, pertes de charges, etc.
- ✚ Une base de données des corps purs et un ensemble de méthodes pour estimer les propriétés des mélanges appelés aussi modèles thermodynamiques.
- ✚ Un schéma de procédé permettant de décrire les liaisons entre les différentes opérations unitaires constituant l'unité PFD (Process Flow Diagram).
- ✚ Un ensemble de méthodes numériques de résolution des équations des modèles mathématiques.^[7]

II.3. Type de simulation

Il y a deux modes de fonctionnement dans un simulateur :

1. Les simulateurs statiques (Steady state mode)

Les simulateurs statiques résolvent des équations statiques qui traduisent le fonctionnement en régime permanent c'est-à-dire à l'équilibre (débit, température, fraction vaporisée...) ainsi que les bilans de matière et d'énergie en régime stabilisé. Parmi ces simulateurs on peut citer : ASPEN PLUS (Aspen Technologies), Design II de (WinSim), Aspen HYSYS (Hyprotech), PRO/II (Simulation Sciences), PROSIM.

2. Les simulateurs dynamiques (Dynamics mode)

Les Simulateurs dynamiques permettent d'évaluer l'évolution des variables dans le temps à partir de la résolution de systèmes d'équations différentielles pendant des situations transitoires où le régime n'est pas stable. Par exemple : Aspen HYSYS (Hyprotech), ASPEN DYNAMICS (Aspen Technologies), Design II de (WinSim), DYMSYM (Simulation Sciences Inc.).

II.4. Utilisation de la simulation

Les différentes tâches qu'un simulateur de procédé devrait effectuer sont :

Dans la conception (engineering)

- Le dimensionnement des équipements.
- La résolution des bilans de matières et d'énergie.
- L'évaluation économique du procédé.
- L'optimisation du procédé.

Dans le suivi des procédés

- Réajustement des paramètres de fonctionnement dans le cas des changements de composition de l'alimentation.
- Détermination de la performance des équipements.^[6]

II.5. Présentation du simulateur « Aspen HYSYS »

Aspen HYSYS est un simulateur de conception « object-oriented », et un simulateur de calcul, qui élargit continuellement les limites du processus en engineering software. Tout changement spécifié sur un élément est répercuté dans tout le modèle et permet de créer des modèles rigoureux statique et dynamique pour le design des unités.^[7]

II.5.1. Environnements de « Aspen HYSYS »

L'environnement dans Aspen HYSYS est un espace de travail où on peut accéder ou introduire des informations concernant la simulation, ces environnements peuvent être groupés en deux catégories:

- a) « Basis environment »
- b) « Simulation environment »

a) The basis environment: Il existe deux types de basis environment:

- ❑ Simulation basis environment: Dans cet environnement on peut créer, définir ou modifier « the fluide package » qui va être utilisé dans la simulation.
- ❑ Oil characterization environment: Cet environnement nous permet de spécifier les caractéristiques des fluides pétroliers et il est accessible seulement par l'intermédiaire de « simulation basis environment ».

b) The simulation environment: il permet de définir la topologie du Flowsheet principal de la simulation. Il est utilisé pour placer et définir les différents courants et opérations unitaires. Il peut contenir d'autres environnements:

- ❑ **Environnement « Sub-Flowsheet » :** il permet de définir la topologie d'un sous-ensemble particulier du schéma principal.
- ❑ **Environnement « Column » :** C'est un environnement particulier permettant de définir la topologie des colonnes (distillation, absorption,...).^[5]

La figure suivante décrit les icônes de plusieurs barres d'outils dans « Aspen HYSYS »:^[4]

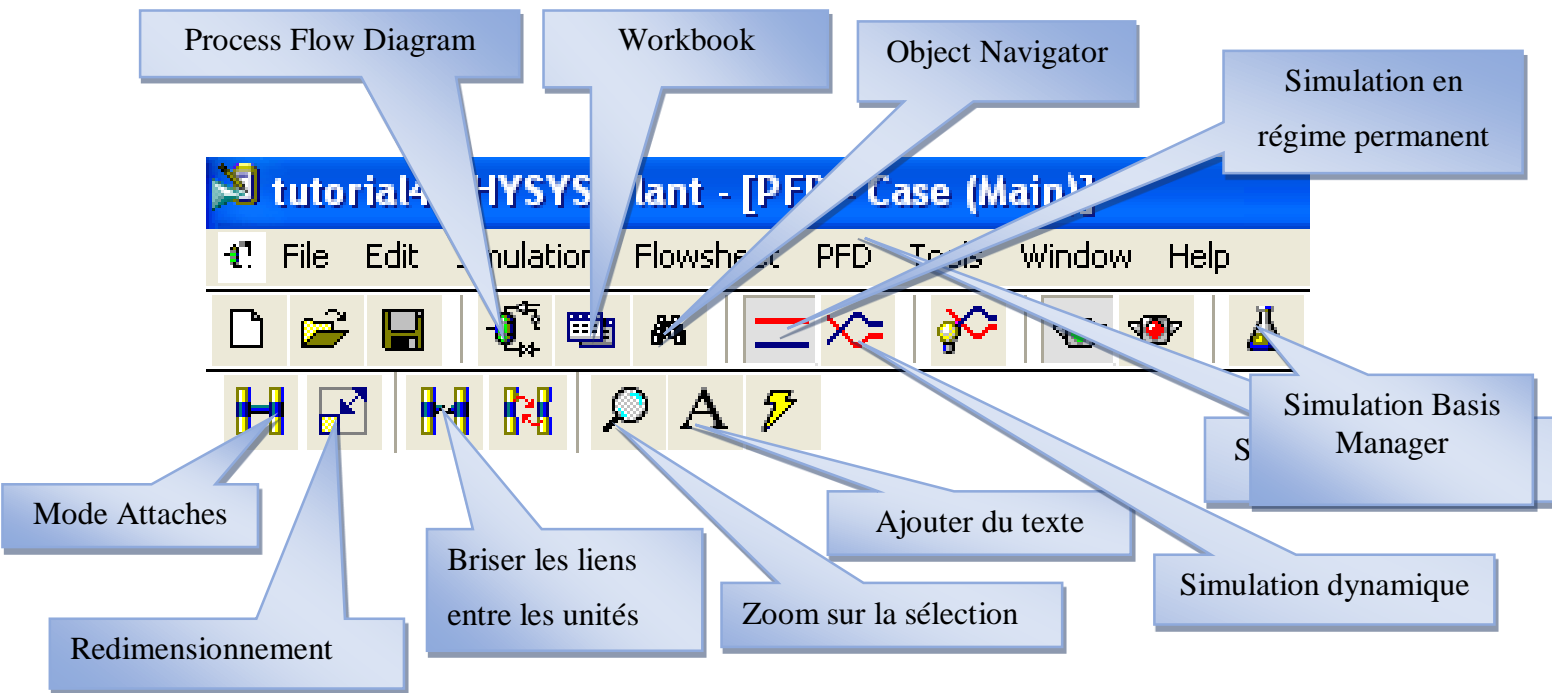


Figure II.1. Barre d'outils « de Aspen HYSYS »

II.5.2. Caractéristiques principales de « Aspen HYSYS »

Cette partie décrit brièvement les caractéristiques importantes qui font d'Aspen HYSYS une plate-forme de simulation et de développement très puissante:

- ❑ La programmation dans « Aspen HYSYS »: HYSYS contient un « Internal Macro Engine » qui supporte la même syntaxe que « Microsoft Visual Basis », donc on peut appliquer différentes tâches sans avoir besoin d'autres logiciels de programmation.
- ❑ « The Integrated Engineering Environment »: toutes les applications nécessaires sont utilisées dans un environnement de simulation commun.
- ❑ Il intègre la possibilité d'une modélisation dans un état stable ou stationnaire et en régime dynamique: la modélisation dans un état stable et l'optimisation étant utilisées lors de la conception des procédés ; la simulation en régime dynamique étant réservée aux études de contrôlabilité de procédés et au développement de stratégies de contrôle.

- ❑ Gestion des événements «Event Driven»: HYSYS combine le calcul interactif (les calculs sont exécutés automatiquement chaque fois que l'on fournit une nouvelle information) avec un accès instantané à l'information (à tout moment il est possible d'accéder à l'information depuis n'importe quel environnement de simulation).
- ❑ Gestion intelligente de l'information « Built-in Intelligence » les calculs des propriétés thermodynamiques s'effectuent instantanément et automatiquement dès qu'une nouvelle information est disponible.
- ❑ Opérations Modulaires: Chaque courant ou unité d'opération peut réaliser tous les calculs nécessaires, en utilisant l'information qui est transmise dans les deux directions à travers les Flowsheets.
- ❑ Algorithme de résolution non séquentielle : on peut construire des Flowsheets dans n'importe quel ordre.^[6]

II.5.3. Les modèles thermodynamiques dans « Aspen HYSYS »

Le logiciel offre une panoplie de modèles thermodynamiques pour le calcul des propriétés thermodynamiques et décrire le comportement d'un système en évolution (opération unitaire, séparation de phases, fractionnement de composants, compression, détente, échange de chaleuretc.), ce sont des équations de conservation de masse, d'énergie et de quantités de mouvement, ces équations peuvent être algébrique ou différentielles, et établi pour une classe de fluide et un domaine de conditions pression et de température recommandée.

Choix du modèle thermodynamique

La réussite de la simulation dépend du choix du modèle thermodynamique, le choix d'un modèle thermodynamique est délicat car il doit aboutir à une méthode relativement validée dans les conditions du procédé (conditions opératoires, nature des fluides étudiés...).

Utilisation des modèles thermodynamique

Les modèles thermodynamiques sont souvent utilisés pour la détermination des propriétés thermo dynamique et propriétés physico-chimiques tel que, le facteur de compressibilité, le volume molaire, la masse volumique, la masse moléculaire, l'enthalpie résiduelle, l'énergie libre résiduelle, l'entropie, le coefficient de fugacité, la constante d'équilibre liquide vapeur et

l'ensemble des dérivées de ces propriétés par rapport à la température et aux fractions molaires ainsi que l'état des composés et des mélanges.^[4]

Chapitre III

Simulation du procédé de production du
gaz de synthèses par vaporeformage du
méthane

III.1 Introduction

Dans ce chapitre, on utilise le simulateur Aspen HYSYS V 7.3 pour réaliser la simulation du procédé de la production du gaz de synthèse par vaporeformage « **Synthesis Gas Production** ». L'objectif d'utiliser ce simulateur est d'obtenir des résultats proches du procédé réel afin de valoriser notre travail.

III.2. Description du procédé sur Aspen HYSYS

Pour décrire et exécuter la simulation du procédé de reformage à la vapeur du méthane par le simulateur HYSYS 7.3 il faut respecter les étapes suivantes:

III.2.1. Introduction des composés du procédé

A chaque début de simulation il est nécessaire d'ajouter la liste des composés chimiques participants à la simulation Figure III.1.

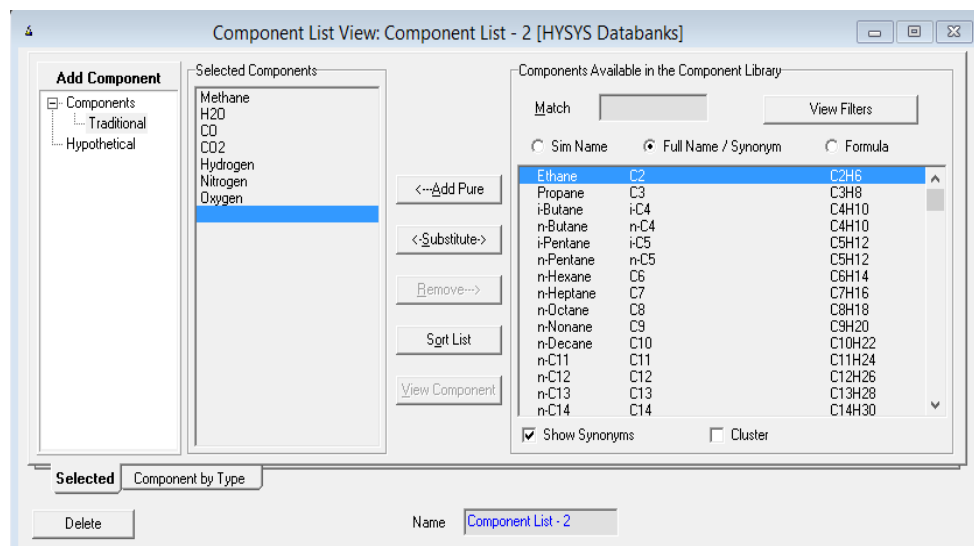


Figure III.1 : Liste des composés chimiques de la simulation

III.2.2 Choix du modèle thermodynamique « Fluid Package »

Pour l'étude des propriétés des gaz réels ou des mélanges les plus complexes, il existe des équations d'état qui relient les paramètres d'équilibre du système particulièrement dans le domaine des hydrocarbures.

La loi qui soutient le modèle des gaz idéaux est définie par l'équation ci-dessous.

$$PV = nRT$$

Cette dernière n'est pas valable pour les gaz réels pour cela on utilise le plus souvent un diagramme thermodynamique, un tableau de propriétés thermodynamiques, ou un jeu d'équations d'état couvrant les diverses zones de pression et température nécessaires. De nombreuses équations d'état ont été proposées et continuent d'être mises au point. Parmi ces équations on cite : l'équation de **Peng Robinson**, l'équation de **Redlich Kwong**, et celle de **Lee Kesler Plocker**.

L'équation d'état généralement utilisée dans le cas des hydrocarbures est celle de Peng Robinson qui s'écrit comme suit :

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{v^2+2bv-b^2}$$

Avec $b=0.0778 \frac{RT_c}{P_c}$

$$a = 0.45724 \frac{R^2 T_c^2}{P_c} [1 + (0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2)(1 - T_r^{0.5})]^2$$

Où

P : pression du système

P_c : Pression critique

T_c : Température critique

T : température

V : volume molaire du gaz

R : la constante universelle des gaz parfaits: $R=8.3144621 \text{ J.K}^{-1}\text{mol}^{-1}$.

Les équations de **Peng-Robinson** (PR) et de **Soave-Redlich-Kwong** (SRK) sont largement utilisées dans l'industrie des hydrocarbures et particulièrement pour le raffinage et le traitement de gaz. Leurs avantages résident dans le fait qu'elles nécessitent peu de données expérimentales, un temps de simulation relativement court et surtout qu'elles conduisent à une bonne estimation des équilibres liquide vapeur pour les hydrocarbures qui sont particulièrement importants pour la conception des procédés. ^[4]

Voici la figure ci-dessous qui montre le choix du « Fluid Package » :

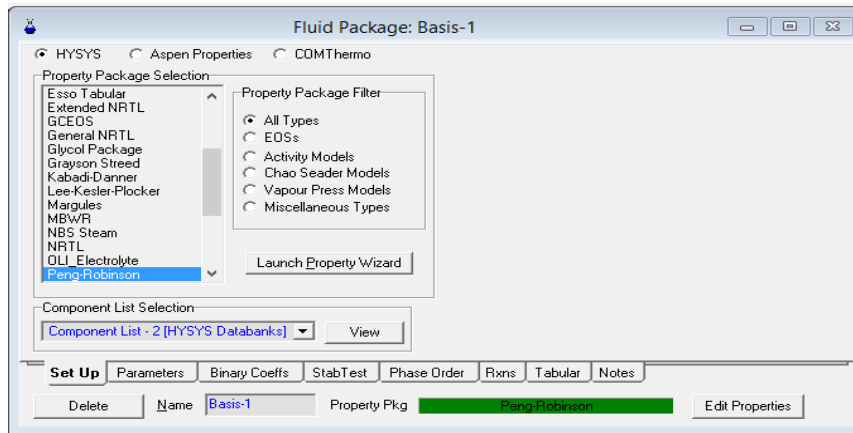


Figure III.2. Choix du modèle thermodynamique

III.2.3 Définition des réactions

Dans cette simulation on a besoin de trois réactions de conversion et une réaction d'équilibre :

Réaction de conversion

Les réactions de reformage sont comme suivies :



La réaction de la combustion



Ces réactions sont introduites selon les spécifications suivantes :

Tableaux III.1. Spécifications des réactions de conversion

| Reaction [Rxn-1] | | |
|-------------------------|----------------------------|-----------------|
| Stoichiometry | Component (Stoich. Coeff.) | Methane (-1) |
| | | Water (-1) |
| | | CO (1) |
| | | Hydrogen (3) |
| Basis | Base component | Methane |
| | Rxn Phase | Vapor phase |
| | Conversion | 40% (Co) |

| Reaction [Rxn-2] | | |
|----------------------|----------------------------|-----------------|
| Stoichiometry | Component (Stoich. Coeff.) | Methane (-1) |
| | | Water (-2) |
| | | CO2 (1) |
| | | Hydrogen (4) |
| Basis | Base component | Methane |
| | Rxn Phase | Vapor phase |
| | Conversion | 30% (Co) |

| Reaction [Rxn-3] | | |
|----------------------|----------------------------|---------------------|
| Stoichiometry | Component (Stoich. Coeff.) | Methane (-1) |
| | | Oxygen (-2) |
| | | CO ₂ (1) |
| | | Water (2) |
| Basis | Base component | Methane |
| | Rxn Phase | Vapor phase |
| | Conversion | 100% (Co) |

Réaction d'équilibre

Le simulateur a une base de données déjà établi pour les réactions d'équilibre, donc on a choisi celle qui convient à notre procédé.



Pour ajouter les réactions en utilisant leurs coefficients stœchiométriques il suffit d'aller sur le tab « **Reactions** » et les ajouter comme suit :

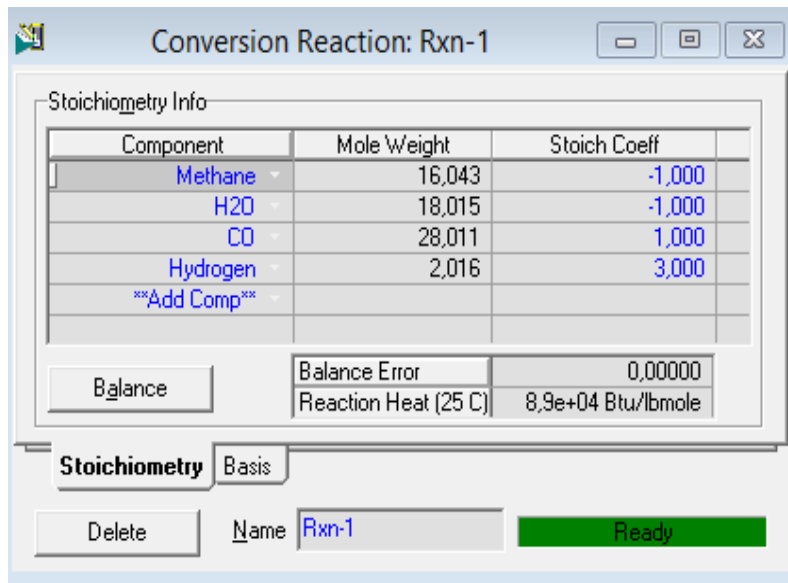


Figure III.3. L'ajout d'une réaction de conversion « Rxn -1 »

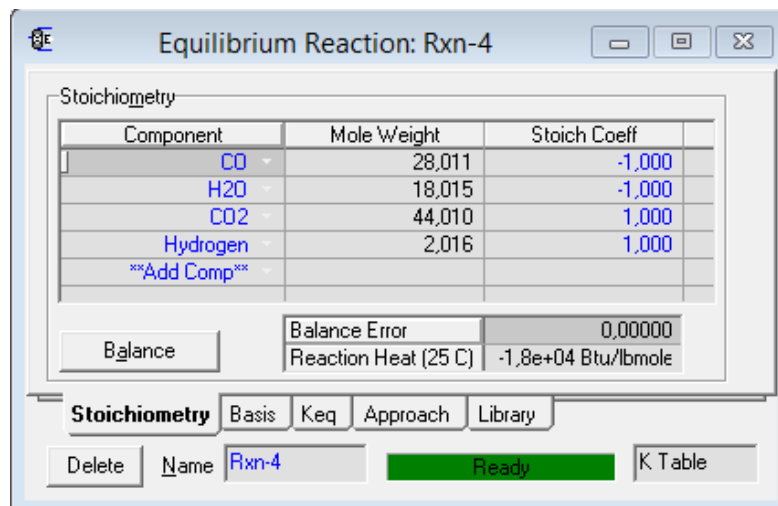


Figure III.4. L'ajout d'une réaction d'équilibre « Rxn - 4 »

III.2.4. Addition des « Set Rxn »

On introduit des « Set Rxn » qui sont des ensembles de réactions présentes dans chaque réacteur. Il faut ensuite les attacher au « Fluid packages » en appuyant sur le bouton « Add to FP » du tab « Reaction Set », on répète cette action pour chaque « Set Rxn ». Les « Set Rxns » qu'on doit définir sont :

Reformer Rxn Set: Rxn-1, Rxn-2

Combustor Rxn Set: Rxn-1, Rxn-2, Rxn-3

Shift Rxn Set: Rxn-4

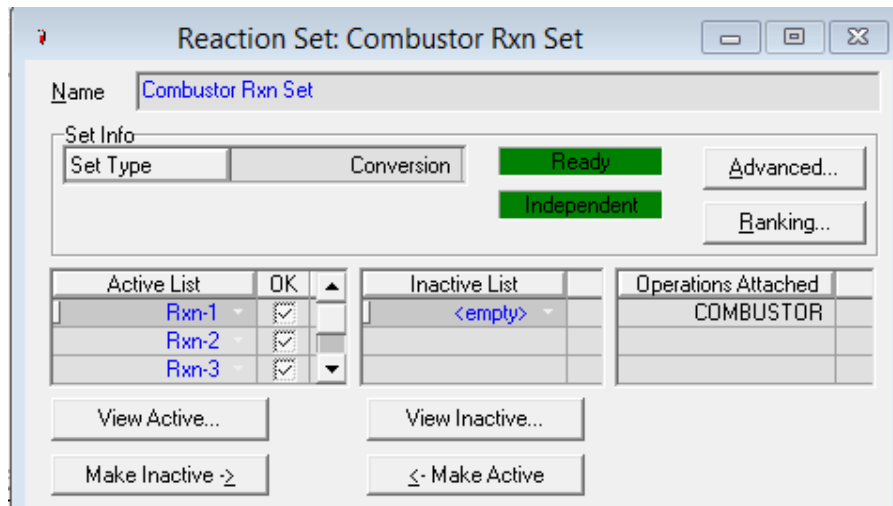


Figure III.5. Attachement de l'ensemble des réactions « Combustor Rxn Set » au réacteur « Combustor »

III.2.5. Introduction des courants de matières « Streams ».

On définit les courants de matière selon les données suivantes :

Tableau III.2. Compositions et paramètres des courants de matière du « reformer ». [8]

| Courant | Natural gas | Reformer Steam | Comb. Steam | Air |
|--------------------------|-------------|----------------|-------------|------|
| Température [°F] | 700 | 475 | 475 | 60 |
| Pression [psia] | 500 | / | / | / |
| Débit Molaire [lbmol/hr] | 200 | 520 | 300 | 200 |
| Comp Mole (CH_4) | 1.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 |
| Comp Mole (H_2O) | 0.00 | 1.00 | 1.00 | 0.00 |
| Comp Mole (CO) | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 |
| Comp Mole (CO_4) | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 |
| Comp Mole (H_2) | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 |
| Comp Mole (N_2) | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.79 |
| Comp Mole (O_2) | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.21 |

III.2.6. Installation des «Set Operations»

On installe les «Set Operations» pour spécifier le rapport entre les pressions des courants et les autres paramètres en commun, pour que le réacteur soit calculé.

Set-1: contrôle la pression du courant «Reformer Steam» entrant dans le réacteur de vaporeformage qui ne doit pas être différente à celle du courant «Natural Gas».

Tableau III.3. Spécification de l'opération «SET-1»

| Set [Set1] | | |
|-------------------|-----------------|----------------|
| Connections | Target Objet | Reformer Steam |
| | Target Variable | Pressure |
| | Source Objet | Natural gas |
| Parameters | Multiplier | 1 |
| | Offset | 0 |

SET-2 : Contrôle la pression du courant de vapeur d'eau « Comb Steam » entrant dans le réacteur de combustion, qui doit être égale aussi à celle du courant « Natural Gas ».

Tableau III.4. Spécification de l'opération «SET-2».

| Set [Set2] | | |
|-------------------|-----------------|-------------|
| Connections | Target Objet | Comb. Steam |
| | Target Variable | Pressure |
| | Source Objet | Natural gas |
| Parameters | Multiplier | 1 |
| | Offset | 0 |

SET-3 : Contrôle la pression du courant «Air», qui ne doit pas être différente à celle du courant «Natural Gas».

Tableau III.5. Spécification de l'opération SET-3.

| Set [Set3] | | |
|-------------------|-----------------|-------------|
| Connections | Target Objet | Air |
| | Target Variable | Pressure |
| | Source Objet | Natural gas |
| Parameters | Multiplier | 1 |
| | Offset | 0 |

III.2.7. Installation des réacteurs

III.2.7.1. Le réacteur « Reformer »

Le réacteur de vaporeformage « Reformer » est un réacteur de conversion « C » dans lequel la majorité du méthane se réagit avec la vapeur d'eau pour produire de l'hydrogène, le monoxyde de carbone et le dioxyde de carbone. Les spécifications de ce réacteur sont résumées dans le tableau suivant :

Tableau III.6. Spécification du réacteur de vaporeformage « Reformer ».

| Conversion Reactor « Reformer » | | |
|--|--|------------------|
| Design [Connections] | Feeds | Natural gas |
| | | Reformer Steam |
| | Vapour outlet | Combustor feed |
| | Liquid outlet | Reformer liq |
| | Energy | Reformer Q |
| Design [parameters] | Optional heat transfer | Heating |
| Worksheet [conditions] | Combustor feed temperature | 1700 °F |
| Reactions [details] | Reaction Set | Reformer Rxn Set |
| Comments | $CH_4 + H_2O \rightarrow CO + 3H_2$ | |
| | $CH_4 + 2H_2O \rightarrow CO_2 + 4H_2$ | |

Après installation du « Reformer » on remarque que 70% du méthane (utilisant 38% de la vapeur d'eau) est converti en un courant composé de 48% d'hydrogène, 8% de CO et 6% de CO₂ (molaire) (Tableau III.7) :

Tableau III.7. Débits molaires (lbmol/hr) des composés des courants d'entrée-sortie du réacteur de vaporeformage « Reformer ».

| Courant en (lbmole/hr) | Natural gas | Reformer Steam | Combustor Feed | Reformer Liq |
|-------------------------|-------------|----------------|----------------|--------------|
| Débit molaire du CH_4 | 200 | 0 | 60 | 0 |
| Débit molaire du H_2O | 0 | 520 | 320 | 0 |
| Débit molaire du CO | 0 | 0 | 80 | 0 |
| Débit molaire en CO_2 | 0 | 0 | 60 | 0 |
| Débit molaire en H_2 | 0 | 0 | 480 | 0 |
| Débit molaire en N_2 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Débit molaire en O_2 | 0 | 0 | 0 | 0 |

III.2.7.2. Le réacteur «Combustor»

Le «**Combustor**» est un réacteur de combustion, est le second réacteur de conversion « C » qui est alimenté par : un courant sortant du Reformer appelé « **Combustor Feed** », un courant de vapeur d'eau « **Comb. Steam** » et un courant d'air « **Air** », comme une source d'Azote N_2 (79%) et d'Oxygène O_2 (21%). Au niveau de ce réacteur le reste du méthane est éliminé par oxydation avec l'Oxygène du courant « **Air** ».

Tableau III.8. Le réacteur de combustion « Combustor ».

| Conversion Reactor « Combustor » | | |
|----------------------------------|--|----------------|
| Design [Connections] | Feeds | Combustor feed |
| | | Air |
| | | Comb. Steam |
| | Vapour outlet | Mid combust |
| | Liquid outlet | Mid liq |
| Reactions [details] | Rxn-1 Conversion | 35% |
| | Rxn-2 Conversion | 65% |
| | Rxn-3 Conversion | 100% |
| Comments | $CH_4 + H_2O \rightarrow CO + 3H_2$ | |
| | $CH_4 + 2H_2O \rightarrow CO_2 + 4H_2$ | |
| | $CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$ | |

A la sortie du « **Combustor** » on remarque l'élimination complète du méthane par vaporeformage et combustion, on distingue également l'apparition de l'azote (N_2) venu du courant « d'**Air** ».

Tableau III.9. Débits molaires (lbmol/hr) des composés des courants d'entrée-sortie du réacteur de combustion « **Combustor** ».

| Courant en (lbmol/hr) | Combustor Feed | Air | Comb. Steam | Mid Liq | Mid Combust |
|-------------------------|----------------|---------|-------------|---------|-------------|
| Débit molaire du CH_4 | 60 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Débit molaire du H_2O | 320 | 0 | 284.9 | 0 | 611.6 |
| Débit molaire du CO | 80 | 0 | 0 | 0 | 90.86 |
| Débit molaire en CO_2 | 60 | 0 | 0 | 0 | 109.1 |
| Débit molaire en H_2 | 480 | 0 | 0 | 0 | 593.2 |
| Débit molaire en N_2 | 0 | 218 | 0 | 0 | 218 |
| Débit molaire en O_2 | 0 | 57.9500 | 0 | 0 | 0 |

III.2.7.3. Les réacteurs d'équilibre « **Shift Reactors** »

On trouve les trois réacteurs d'équilibre « **Shift Reactors** » à savoir : « **Combustor Shift** », « **Shift Reactor 1** », « **Shift Reactor 2** ». Ces réacteurs ont comme rôle de convertir le monoxyde de carbone présent dans le courant de matière sortant du « **Combustor** » comme le montre la réaction (III.4) et produire plus d'hydrogène. Ces réacteurs ont les spécifications suivantes :

Tableau III.10. Le réacteur d'équilibre « **Combustor Shift** ».

| Equilibrium Reactor« Combustor Shift » | | |
|---|---|---------------|
| Design [Connections] | Feeds | Mid combust |
| | Vapour outlet | Shift1 feed |
| | Liquid outlet | Mid combliq |
| Reactions [details] | Reaction set | Shift Rxn set |
| Comments | Reaction : $CO + H_2O \leftrightarrow CO_2 + H_2$ | |

Tableau III.11. Le réacteur d'équilibre « Shift reactor 1 ».

| Equilibrium Reactor « Shift reactor 1 » | | |
|--|---|---------------|
| Design [connections] | Feeds | Shift1 feed |
| | Vapour outlet | Shift2 feed |
| | Liquid outlet | Shift1 liq |
| | Energy | Shift1 Q |
| Design [parameters] | Optional heat transfer | Cooling |
| Worksheet [conditions] | Combustor feed temperature | 850 °F |
| Reactions [details] | Reaction set | Shift Rxn set |
| Comments | Reaction : $CO + H_2O \leftrightarrow CO_2 + H_2$ | |

Tableau III.12. Le réacteur d'équilibre « Shift reactor 2 ».

| Equilibrium Reactor « Shift reactor 2 » | | |
|--|---|---------------|
| Design [Connections] | Feeds | Shift1 feed |
| | Vapour outlet | Synthesis Gas |
| | Liquid outlet | Shift2 liq |
| | Energy | Shift2 Q |
| Design [parameters] | Optional heat transfer | Cooling |
| Worksheet [condtions] | Combustor feed temperature | 750 °F |
| Reactions [details] | Reaction set | Shift Rxn set |
| Comments | Reaction : $CO + H_2O \leftrightarrow CO_2 + H_2$ | |

Le tableau suivant montre les débits molaires des courants d'entrée et de sorties de tous les « Shift Reactors » où on remarque la conversion d'une quantité de CO en CO₂ :

Tableau III.13. Débits molaires (lbmol/hr) des composés des courants d'entrée-sortie des réacteurs « shift reactors ».

| Courant en (lbmol/hr) | Mid Combust | Synthesis gas |
|-------------------------|-------------|---------------|
| Débit molaire du CH_4 | 0 | 0 |
| Débit molaire du H_2O | 611.6 | 539.6 |
| Débit molaire du CO | 90.86 | 18.85 |
| Débit molaire en CO_2 | 109.1 | 181.2 |
| Débit molaire en H_2 | 593.2 | 665.2 |
| Débit molaire en N_2 | 218 | 218 |
| Débit molaire en O_2 | 0 | 0 |

III.2.8. Introduction des « Adjusts »

Pour maintenir la température de combustion à 1700 °F on installe une « **Adjust Operation** » qui maintient la température par rapport au débit du courant de vapeur entrant dans le « **Combustor** ».

Tableau III.14. Operation Adjust « ADJ-1 ».

| Adjust [ADJ-1] | | |
|-----------------------|--------------------|-----------------|
| Connections | Adjusted Objet | Comb. Steam |
| | Adjusted Variable | Molar Flow |
| | Target Objet | Combustor Shift |
| | Target Variable | VesselTemp |
| | Spec. Target Value | 1700 °F |
| Parameters | Method | Secant |
| | Tolerance | 0.1 °F |
| | Step size | 50 lbmol/hr |
| | Maximum Iterations | 25 |

III.2.9. Installation du Spreadsheet

Le gaz de synthèse destiné à la synthèse de l'ammoniac doit avoir un rapport molaire H_2/N_2 légèrement supérieur à 3. Pour maintenir ce rapport dans le courant final, On crée un « **Spreadsheet** » comme le montre la figure III.6 et on ajoute une autre opération « **Adjust 2** » pour ajuster le débit molaire de l'air.

Le rôle du « **Spreadsheet** » est de calculer le rapport molaire H_2/N_2 , il faut donc introduire la formule suivante dans la cellule B4 « **H₂ : N₂ Molar ratio** » :

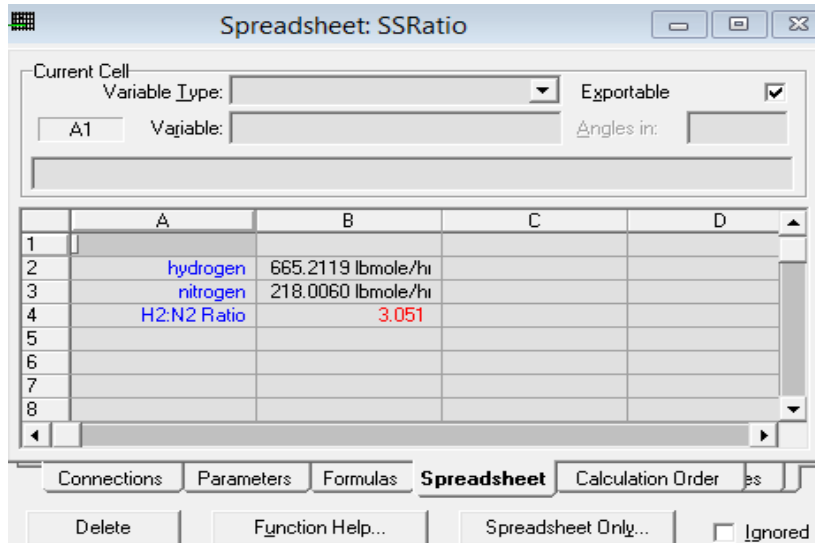


Figure III.6. Spreadsheet

On installe une deuxième « Adjust Operation » pour contrôler le débit molaire, cette opération doit avoir les spécifications suivantes :

Tableau III.15. Opération Adjust « ADJ-2 »

| Adjust [ADJ-2] | | |
|----------------|--------------------|---|
| Connections | Adjusted Object | Air Molar Flow |
| | Adjusted Variable | SSRatio, B4 :H ₂ :N ₂ Ratio |
| | Spec. Target Value | 3.05 |
| Parameters | Method | Secant |
| | Tolerance | 0.005 lbmol/hr |
| | Step size | 39.6 lbmol/hr |
| | Maximum Iterations | 20 |

III.2.10. Process Flow Diagram (PFD) final

La figure suivante montre le procédé final de la simulation de production du gaz de synthèse par vaporeformage du méthane.

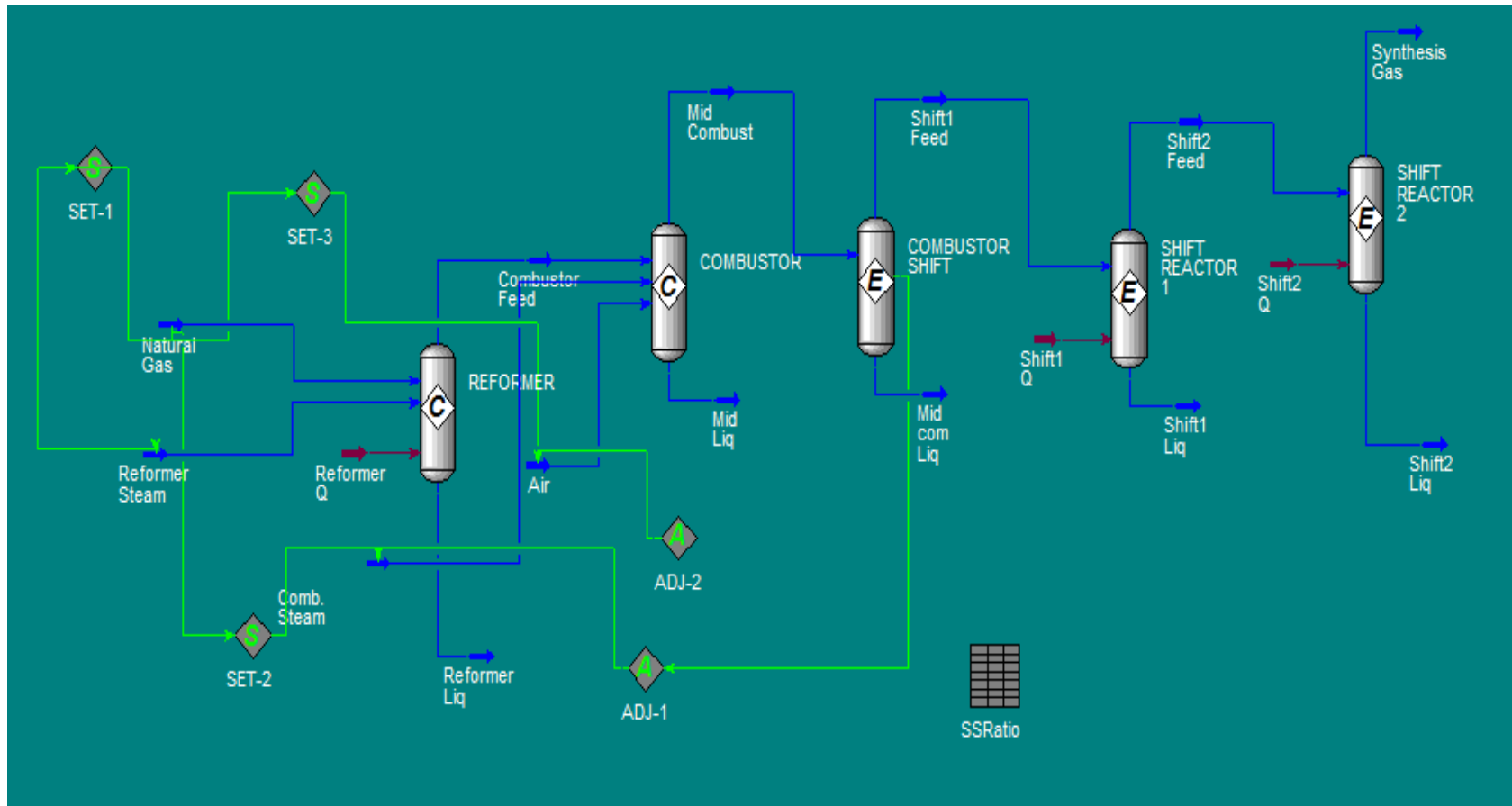


Figure III.7. Le PFD final du procédé « Synthesis Gas Production »

III.3. Interprétation des Résultats Obtenus

Les graphes suivants montrent la variation des débits molaires et compositions molaires des composés (Méthane, Hydrogène, Azote, Monoxyde de Carbone et Dioxyde de carbone) le long du procédé et la variation de la température dans les courants de sortie de chaque opération unitaire, ainsi qu'un graphe montrant que la pression reste constante le long de tout le procédé (P=500 psia).

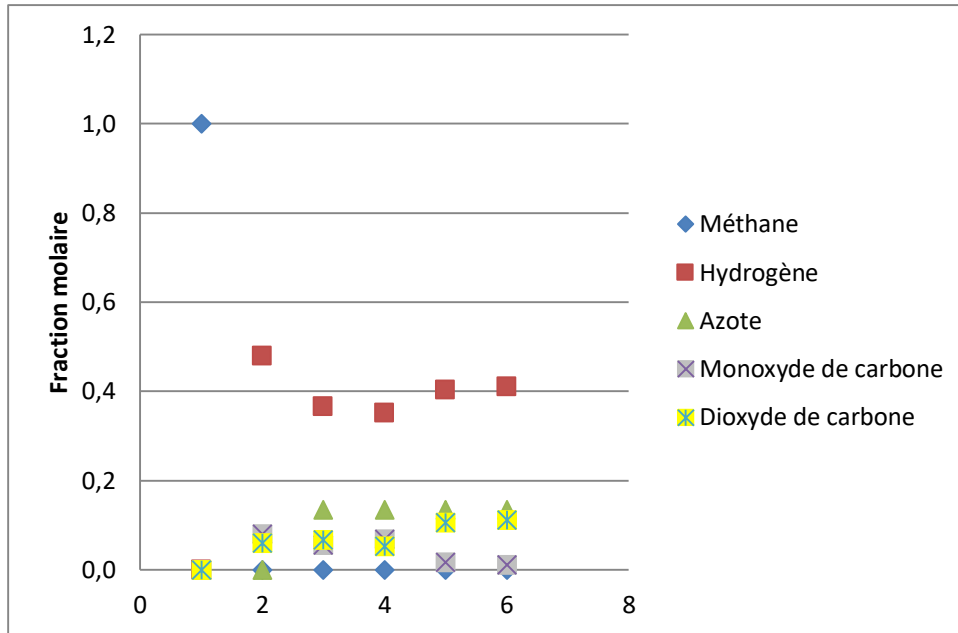


Figure III.8. Variation de la fraction molaire des composés dans les courants de sortie de chaque réacteur.

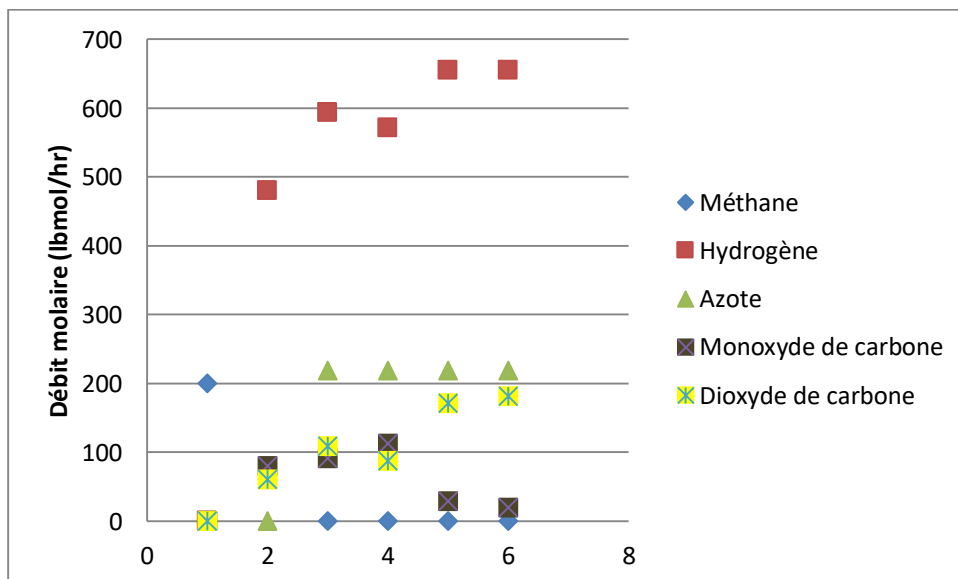


Figure III.9. Variation des débits molaires des composés dans les courants de sortie de chaque réacteur.

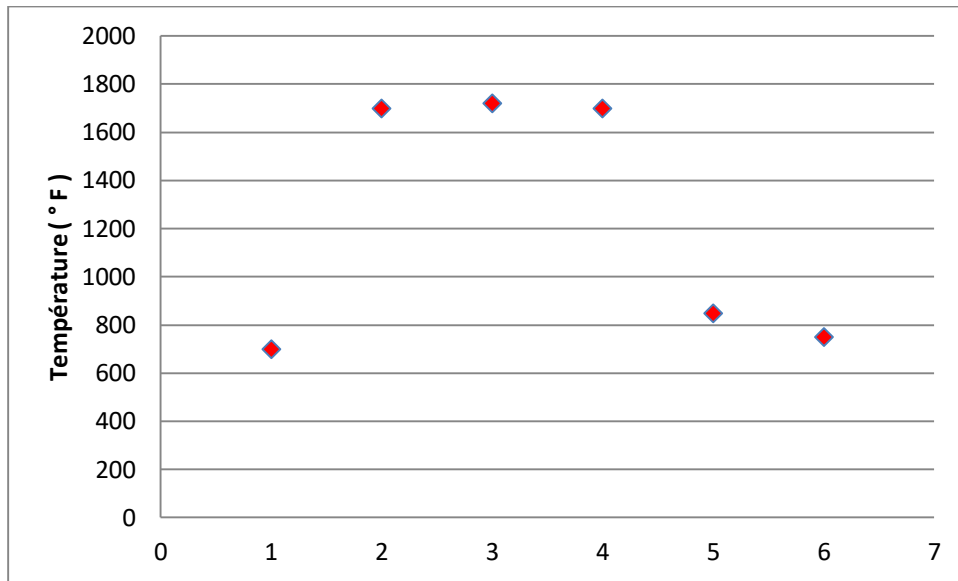


Figure III.10. La variation de la température dans les courants de sortie de chaque réacteur.

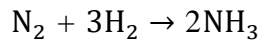
D'après les graphes et les résultats obtenus (Annexe), on peut déduire que :

- ❖ Le long du procédé, on remarque que les fractions ainsi que les débits molaires d'oxygène sont nuls dans les courants de sortie de chaque réacteur. Dans les « **Reformer** » et « **Combustor** » la grande quantité du méthane est complètement éliminée et que la fraction et le débit de l'azote sont constants pour le reste du procédé (**0.1343 et 218 lbmol/hr**).
- ❖ Dans le premier réacteur « **Reformer** », la plupart de la quantité du méthane est consommée par la réaction de vaporeformage où la somme du taux de conversion est 70% divisé comme suit (40% pour Rxn-1 et 30% pour Rxn-2) et la quantité du méthane restante 30% est consommé dans le réacteur « **Combustor** » par vaporeformage dans les réactions Rxn-1 et Rxn-2 et par combustion par l'oxygène présent dans l'air Rxn-3.
- ❖ La réaction **WGS** (Water Gas Shift) contribue environ de 15 % à la production totale d'hydrogène car les réacteurs d'équilibre « Shift Reactors » ont le rôle de diminuer la quantité du CO dans le gaz produit et le transformer en CO₂ à l'aide de la réaction Rxn-4 ainsi que de refroidir le gaz de synthèse produit de 1700 °F à 750 °F.
- ❖ À la fin du procédé, on constate que le gaz de synthèse produit à un débit molaire d'hydrogène de **655.2 lbmol/hr** et un débit d'azote de **218 lbmol/hr**. Donc le rapport H₂/N₂ qui est égal à **3.0055** est respecté.

Conclusion

Conclusion Générale

La simulation du procédé de production du gaz de synthèse par vaporeformage du méthane en utilisant Aspen HYSYS V 7.3 est le thème général abordé dans ce manuscrit. Le rôle de cette simulation est de maintenir le rapport molaire dans le gaz produit : $H_2/N_2=3$ car le procédé de production de l'ammoniac à partir du gaz de synthèse se réalise en respectant les coefficients stœchiométriques et en faisant réagir le diazote de l'air et le dihydrogène comme le montre la réaction d'équilibre suivante :



A travers ce logiciel on a pu mieux comprendre le procédé et avoir une vision générale sur les propriétés, les compositions et les débits des courants d'entrée et de sortie de toutes les opérations unitaires.

On a choisis ce logiciel à cause de ses performances et ses diverses applications dans le domaine des industries pétrochimiques. Dans cette simulation on a suivi toutes les étapes comme ceux d'un procédé réel, dont la première étape est la conversion du méthane en H_2 , la deuxième est l'injection de l'air pour la combustion du méthane et l'ajout de l'azote dans le gaz de synthèse et comme dernière étape l'élimination du monoxyde de carbone en le transformant en dioxyde de carbone.

A la fin de ce travail on a conclu que les résultats obtenus sont bien raisonnables et utiles pour notre expérience ce qui nous confirme l'utilité et la fiabilité du logiciel utilisé et cela nous incite à l'utiliser pour étudier d'autres procédés industriels.

Annexes

Annexe

Création d'une nouvelle simulation

Démarrage du logiciel « HYSYS »

A partir du menu démarrer → Tous les programmes → « Aspen Tech » → « Aspen HYSYS »,
En suite il suffit de sélectionner « **New case** » dans le menu « **File** ».



Figure: Icône du simulateur « HYSYS ».

The image is a screenshot of the AspenONE Simulation Basis Manager software interface. The window title is "Simulation Basis Manager". The interface is divided into several sections. On the left, there is a "Configuration" panel with "Reactions" selected. Below this, there are tabs for "Components", "Fluid Pkgs", "Hypotheticals", "Oil Manager", "RefSYS Assay Manager", "Reactions", "Component Maps", and "User Properties". The "Reactions" tab is active, showing a list of reactions: "Rxn-1", "Rxn-2", "Rxn-3", and "Rxn-4". A context menu is open over "Rxn-1", with options: "View Rxn...", "Add Rxn...", "Delete Rxn...", and "Copy Rxn...". At the bottom of the window, there are buttons for "Enter EVT Environment..." and "Return to Simulation Environment...". Three callout boxes with blue backgrounds and white text are overlaid on the image. One callout points to the "Reactions" tab and says "Choisir le modèle thermodynamique". Another callout points to the "Components" tab and says "Choisir les composés inclus dans le procédé". A third callout points to the "Add Rxn..." button and says "Création de réactions".

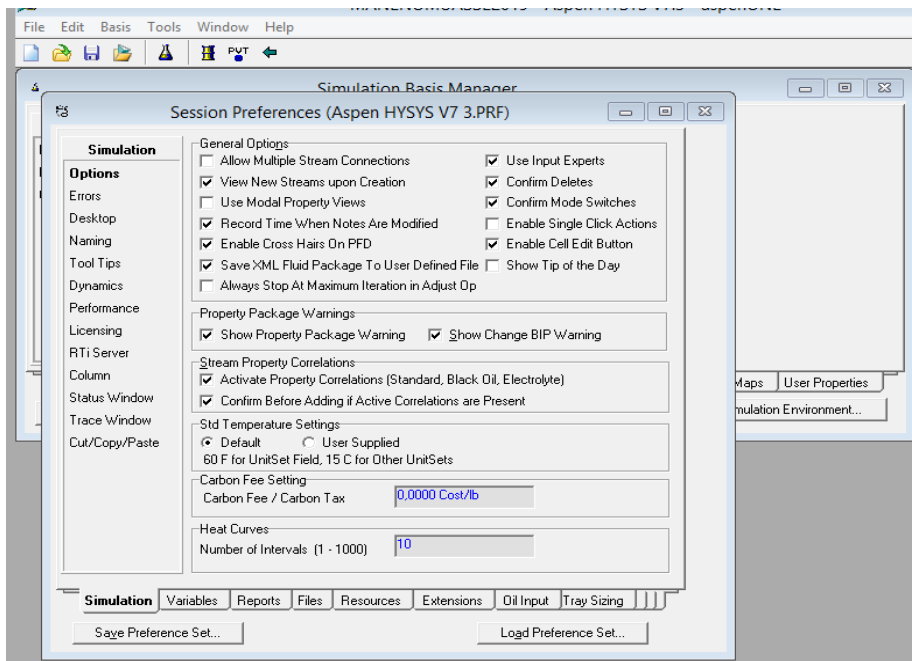
Choisir le modèle thermodynamique

Choisir les composés inclus
dans le procédé

Création de réactions

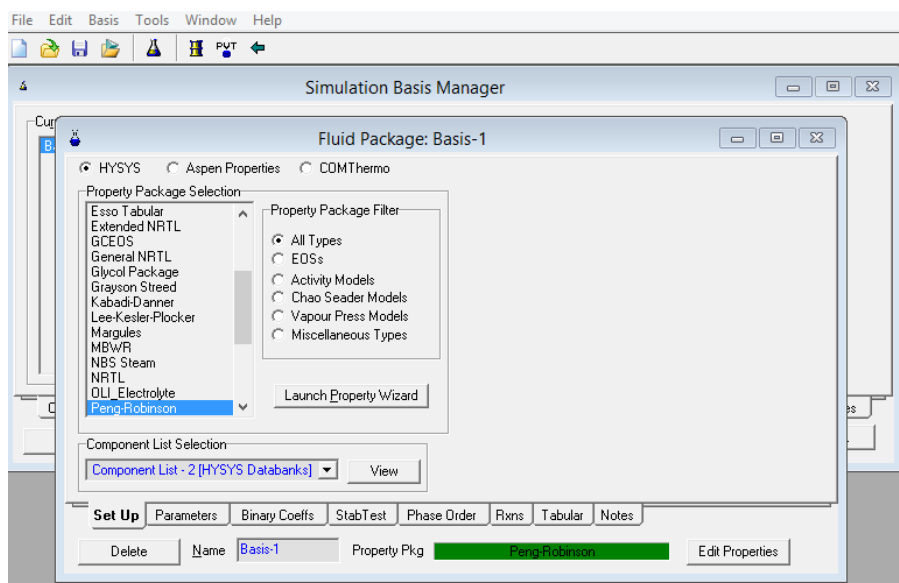
Choix du système d'unités

La première chose à faire quand on entre dans HYSYS est de choisir son ensemble d'unités. Pour cela, il vous faut sélectionner **Unit Sets** dans le menu **Home** après Units of Measure et ensuite choisir le système d'unités désiré.



Création du « Fluid Package »

Presser la touche « **Propriétés** » pour créer un « **Fluid Package** » et choisir le modèle voulu.

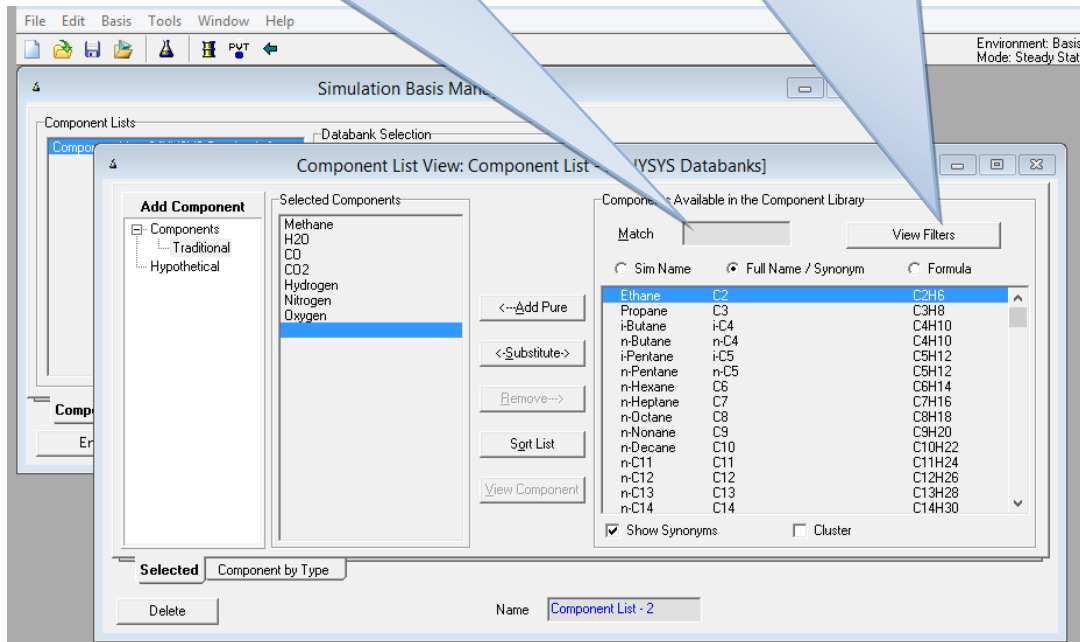


Choix des composés du procédé

L'étape suivante est l'introduction de tous les composants qui participent dans le procédé en utilisant l'onglet « **Components** ».

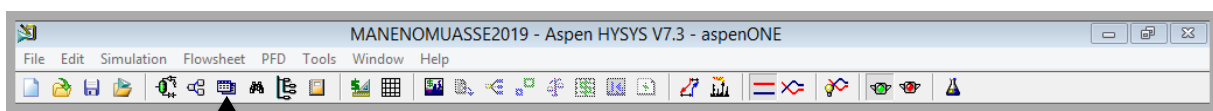
Permet de consulter les propriétés de chaque composé. Ex.: T et P critiques

Choisir les composés impliqués dans toutes les étapes du procédé : en écrivant le nom au long ou la formule chimique. Un filtre (*FamilyFilter*) permet de trouver les composés répartis en sous-catégories



Construction du schéma de procédé

L'une de façon pour construire un schéma de procédé.

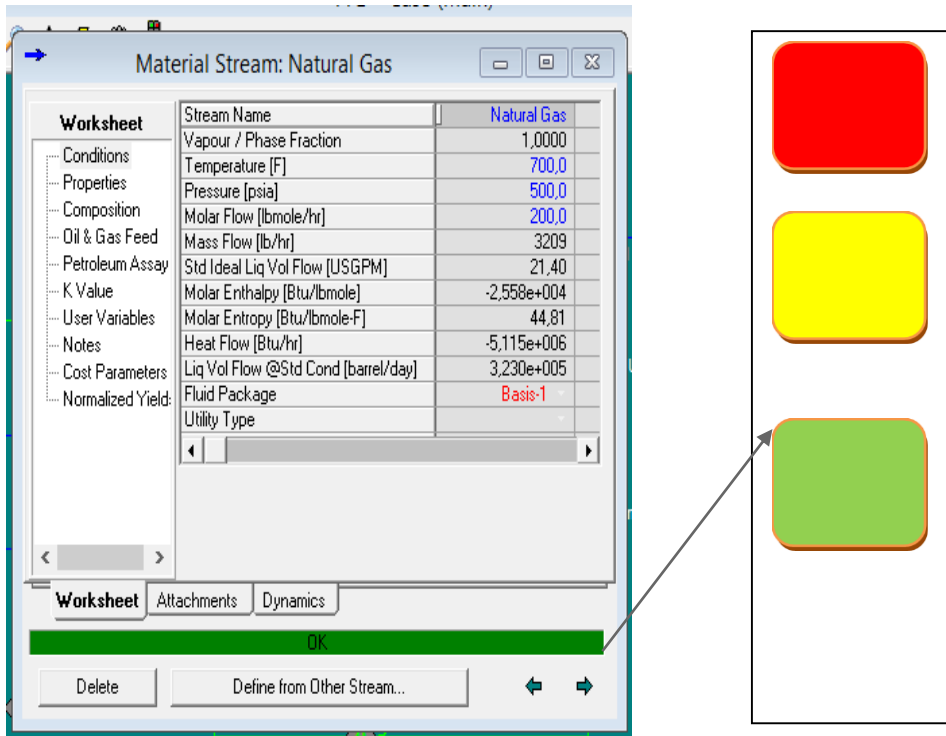


Workbook

Courants et unités

Évolution du processus de calcul :

- Rouge : informations importantes manquante
- Jaune : informations importantes données mais degré de liberté > 0
- Vert : Ok



Les outils d'analyse des résultats

The workbook : C'est un ensemble de « tab » où les données du procédé sont affichées sous forme tabulaire il n'est pas utile seulement pour l'analyse du procédé mais aussi pour la construction du « flowsheet », un autre avantage de cet outil c'est qu'on peut modifier directement dans le tableau et les calculs seront automatiquement mis à jour.

| Name | Natural Gas | Reformer Stear | Comb. Steam | Air |
|----------------------------|----------------|----------------|-------------|-------------|
| Vapour Fraction | 1,0000 | 1,0000 | 1,0000 | 1,0000 |
| Temperature [F] | 700,0 | 475,0 | 475,0 | 60,00 |
| Pressure [psia] | 500,0 | 500,0 | 500,0 | 500,0 |
| Molar Flow [lbmole/hr] | 200,0 | 520,0 | 284,9 | 276,0 |
| Mass Flow [lb/hr] | 3209 | 9368 | 5132 | 7961 |
| Liquid Volume Flow [USGPM] | 21,40 | 18,75 | 10,27 | 18,38 |
| Heat Flow [Btu/hr] | -5,115e+006 | -5,272e+007 | -2,889e+007 | -6,625e+004 |
| Name | Combustor Feer | Reformer Liq | Mid Combust | Mid Liq |
| Vapour Fraction | 1,0000 | 0,0000 | 1,0000 | 0,0000 |
| Temperature [F] | 1700 | 1700 | 1721 | 1721 |
| Pressure [psia] | 500,0 | 500,0 | 500,0 | 500,0 |
| Molar Flow [lbmole/hr] | 1000, | 0,0000 | 1623 | 0,0000 |

The data book : c'est un outil qui nous permet de représenter les variables clé du procédé sous forme tabulaire ou graphique dans les deux modes : stationnaire et dynamique

Le workbook

MANENOMUASSE2019 - Aspen HYSYS V7.3 - aspenONE - [Workbook - Case (Main)]
File Edit Simulation Flowsheet Workbook Tools Window Help

| Name | Natural Gas | Reformer Stear | Comb. Steam | Air | Combustor Feed | Reformer Liq | Mid Combust | Mid Liq | Shift1 Feed |
|----------------------------|-------------|----------------|-------------|---------------|----------------|--------------|-------------|---------|-------------|
| Vapour Fraction | 1,0000 | 1,0000 | 1,0000 | 1,0000 | 1,0000 | 0,0000 | 1,0000 | 0,0000 | 1,0000 |
| Temperature [F] | 700,0 | 475,0 | 475,0 | 60,00 | 1700 | 1700 | 1721 | 1721 | 1700 |
| Pressure [psia] | 500,0 | 500,0 | 500,0 | 500,0 | 500,0 | 500,0 | 500,0 | 500,0 | 500,0 |
| Molar Flow [lbmole/hr] | 200,0 | 520,0 | 284,9 | 276,0 | 1000 | 0,0000 | 1623 | 0,0000 | 1623 |
| Mass Flow [lb/hr] | 3209 | 9368 | 5132 | 7961 | 1,258e+004 | 0,0000 | 2,567e+004 | 0,0000 | 2,567e+004 |
| Liquid Volume Flow [USGPM] | 21,40 | 18,75 | 10,27 | 18,38 | 57,61 | 0,0000 | 89,34 | 0,0000 | 88,07 |
| Heat Flow [Btu/hr] | -5,115e+006 | -5,272e+007 | -2,889e+007 | -6,625e+004 | -3,539e+007 | 0,0000 | -6,434e+007 | 0,0000 | -6,434e+007 |
| Name | Mid com Liq | Shift2 Feed | Shift1 Liq | Synthesis Gas | Shift2 Liq | ** New ** | | | |
| Vapour Fraction | 0,0000 | 1,0000 | 0,0000 | 1,0000 | 0,0000 | | | | |
| Temperature [F] | 1700 | 850,0 | 850,0 | 750,0 | 750,0 | | | | |
| Pressure [psia] | 500,0 | 500,0 | 500,0 | 500,0 | 500,0 | | | | |
| Molar Flow [lbmole/hr] | 0,0000 | 1623 | 0,0000 | 1623 | 0,0000 | | | | |
| Mass Flow [lb/hr] | 0,0000 | 2,567e+004 | 0,0000 | 2,567e+004 | 0,0000 | | | | |
| Liquid Volume Flow [USGPM] | 0,0000 | 92,95 | 0,0000 | 93,53 | 0,0000 | | | | |
| Heat Flow [Btu/hr] | 0,0000 | -7,770e+007 | 0,0000 | -7,923e+007 | 0,0000 | | | | |

Material Streams

Compositions

Energy Streams

Unit Ops

SHIFT REACTOR 1

SHIFT REACTOR 2

Fluid Pkg All

Include Sub-Flowsheets
 Show Name Only
 Number of Hidden Objects: 0

Horizontal Matrix

Completed.
▲▼



| Name | Natural Gas | Reformer Stear | Comb. Steam | Air | Combustor Fee | Reformer Liq | Mid Combust | Mid Liq | Shift1 Feed |
|---------------------------|-------------|----------------|-------------|---------------|---------------|--------------|-------------|---------|-------------|
| Comp Mole Frac (Methane) | 1,0000 | 0,0000 | 0,0000 | 0,0000 | 0,0600 | 0,0600 | 0,0000 | 0,0000 | 0,0000 |
| Comp Mole Frac (H2O) | 0,0000 | 1,0000 | 1,0000 | 0,0000 | 0,3200 | 0,3200 | 0,3769 | 0,3769 | 0,3904 |
| Comp Mole Frac (CO) | 0,0000 | 0,0000 | 0,0000 | 0,0000 | 0,0800 | 0,0800 | 0,0560 | 0,0560 | 0,0695 |
| Comp Mole Frac (CO2) | 0,0000 | 0,0000 | 0,0000 | 0,0000 | 0,0600 | 0,0600 | 0,0673 | 0,0673 | 0,0537 |
| Comp Mole Frac (Hydrogen) | 0,0000 | 0,0000 | 0,0000 | 0,0000 | 0,4800 | 0,4800 | 0,3655 | 0,3655 | 0,3520 |
| Comp Mole Frac (Nitrogen) | 0,0000 | 0,0000 | 0,0000 | 0,7900 | 0,0000 | 0,0000 | 0,1343 | 0,1343 | 0,1343 |
| Comp Mole Frac (Oxygen) | 0,0000 | 0,0000 | 0,0000 | 0,2100 | 0,0000 | 0,0000 | 0,0000 | 0,0000 | 0,0000 |
| Name | Mid com Liq | Shift2 Feed | Shift1 Liq | Synthesis Gas | Shift2 Liq | ** New ** | | | |
| Comp Mole Frac (Methane) | 0,0000 | 0,0000 | 0,0000 | 0,0000 | 0,0000 | | | | |
| Comp Mole Frac (H2O) | 0,3904 | 0,3387 | 0,3389 | 0,3325 | 0,3325 | | | | |
| Comp Mole Frac (CO) | 0,0695 | 0,0178 | 0,0178 | 0,0116 | 0,0116 | | | | |
| Comp Mole Frac (CO2) | 0,0537 | 0,1054 | 0,1054 | 0,1116 | 0,1116 | | | | |
| Comp Mole Frac (Hydrogen) | 0,3520 | 0,4037 | 0,4036 | 0,4099 | 0,4099 | | | | |
| Comp Mole Frac (Nitrogen) | 0,1343 | 0,1343 | 0,1343 | 0,1343 | 0,1343 | | | | |
| Comp Mole Frac (Oxygen) | 0,0000 | 0,0000 | 0,0000 | 0,0000 | 0,0000 | | | | |

Material Streams **Compositions** Energy Streams Unit Ops

FeederBlock_Natural Gas

SET-1

SET-2

SET-3

Horizontal Matrix

Fluid Pkg All

Include Sub-Flowsheets

Show Name Only

Number of Hidden Objects: 0



Références Bibliographiques

- [1] Biométhane de gazéification – évaluation du potentiel de production en France aux horizons 2020 et 2050 ; GrDF (Société Anonyme au capital de 1 800 000 000 euros), rapport final – janvier 2013
- [2] Fabrice GIROUDIÈRE, André LE GALL, « Technique d'Ingénieur », 2012
- [3] Mamadou MBODJI, Conception et dimensionnement de réacteurs échangeurs microstructures pour la production de gaz de synthèse par vaporeformage du méthane, Lorraine-France, 2013
- [4] KECHE Sarra, Étude de la substitution du solvant mea par l'amDEA dans la section de décarbonatation du complexe GL1/z, Université de Mostaganem – Algérie, 2017
- [5] DJEBBARI Abdel basset, Simulation d'une unité de production de méthanol à l'aide de l'Aspen plus-Hysys, Biskra-Algérie, 2014
- [6] MEKCEM Maroua, Dimensionnement d'un échangeur à tubes et calandre de l'unité de décarbonatation du complexe GL1K Skikda-Algérie, 2017
- [7] BENDAAS Okba, OUKACHA Cylia, Optimisation des paramètres de fonctionnement du dééthaniseur (C-701) et du débutaniseur (C-702) de la section de fractionnement du gaz à l'UTG de Guellala, Boumerdes- Algérie, 2017
- [8] Hysys 2004.2, Tutorials & Applications, 2005