

	الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية	
	People's Democratic Republic of Algeria	
	وزارة التعليم العالي والبحث العلمي	
	Ministry of Higher Education and Scientific Research	
	جامعة عبد الحميد ابن باديس مستغانم	
	Abdel Hamid Ibn Badis University - Mostaganem	
	كلية العلوم والتكنولوجيا	
	Faculty of Sciences and Technology	
	قسم هندسة الطرائق	
	Department of Process Engineering	

N° d'ordre : M2... .. /GP/2024

MEMOIRE DE FIN D'ETUDES DE MASTER ACADEMIQUE

Filière : Génie des Procédés

Spécialité : Génie Chimique

Thème

**Simulation de la colonne de distillation de la section 600 (CP1/Z)
en vue de l'amélioration de la qualité (IMPCA) du Méthanol**

Présenté par :

BOUACHERINE Malissa Rezkia

Soutenu le **30/06/ 2024** devant le jury composé de :

Président(e) : Mme MENAD Karima	Maitre de Conférences "A"	Université de Mostaganem
Examineurs : Mme BENMEKKI Fadéla	Maître Assistant "A"	Université de Mostaganem
Encadrant (e) : M. ABSAR	Professeur	Université de Mostaganem

Année universitaire 2023 / 2024

Dédicaces

Je dédie ce travail à :

Mon père pour ses sacrifices, ses efforts et son encouragement toute sa vie juste pour voir le jour de l'obtention de mon diplôme de master.

Merci papa

Ma Mère pour ses soutiens et ses affections, je suis fière de suivre le même chemin que vous avez poursuivi.

Mes frères BOUZID et SIDAALI pour leurs supports

Ma chère famille pour leur amour.

Mes amies GHIZLANE et SALIMA

Remerciements

En commencement, je remercie ALLAH d'avoir béni mon chemin, et grâce à lui je suis arrivée là où je suis aujourd'hui.

Je tiens à remercier mon encadrant Pr. ABSAR Belkacem pour la qualité de son encadrement, sa patience et son soutien moral durant la préparation de ce mémoire

Je tiens aussi à remercier M. SLIMANI Tarik et M. DJABEUR Mansour pour leur suivi, leur aide et leurs précieux conseils durant la période du stage pratique au complexe CP1Z.

Liste des figures

Figure I-1 : Etiquette du méthanol.	- 4 -
Figure II-1 : Distribution du Gaz Naturel [3].....	- 9 -
Figure II-2 : Reforming Catalytique [3].....	- 10 -
Figure II-3 Refroidissement Et Élimination de l'eau [3].	- 11 -
Figure II-4 : Station de compression du gaz synthèse [3].....	- 12 -
Figure II-5 : Synthèse du méthanol [3].	- 13 -
Figure II-6 Distillation du méthanol brut [3].	- 14 -
Figure II-7 : Système de production de la vapeur [3].	- 15 -
Figure III-1 : Différents types de plateaux.	- 17 -
Figure III-2 : Schéma d'une colonne de distillation industrielle.	- 19 -
Figure III-3 : Flux de matière intervenant dans une colonne de distillation.....	- 20 -
Figure IV-1 : Principales étapes de la simulation.	- 28 -
Figure V-1 : Simulation de la Colonne V-602 avec Hysys (flowsheet).....	- 37 -
Figure V-2 : Fonction ShortCut Column.....	- 41 -
Figure V-3 : Définition de la liste des constituants.	- 41 -
Figure V-4 : Définition du Modèle thermodynamique « Fluid package ».	- 42 -
Figure V-5 : Définition de la composition du débit d'alimentation.	- 42 -
Figure V-6 : Conditions de température, pression et débit du V-603	- 43 -
Figure V-7 : Connections des différents débits.	- 44 -
Figure V-8 : Paramètres demandés par V-603.	- 45 -
Figure V-9 : Paramètres nécessaires pour le fonctionnement du V-603.	- 46 -

Figure V-10 : Résultats obtenu par Shortcut column.	- 47 -
Figure V-11 : Simulation finale du V-602 et V-603.	- 50 -
Figure V-12 : Conditions thermodynamiques et débits de chaque Stream.	- 50 -
Figure V-13 : Compositions molaires de chaque Stream.	- 51 -

Liste des tableaux

Tableau I-1 : Propriétés physiques du méthanol.....	- 5 -
Tableau I-2 : Conditions de chaque spécification.....	- 6 -
Tableau IV-1 : Différentes équations d'état.....	- 30 -
Tableau IV-2 : Différents modèles d'activité.	- 31 -
Tableau V-1 : Composition massique de la charge V-602	- 35 -
Tableau V-2 : Caractéristiques techniques de la colonne V-602	- 36 -
Tableau V-3 : Compositions massiques dans la colonne V-602.....	- 36 -
Tableau V-4 : Compositions du distillat spécifié par la norme IMPCA.	- 38 -
Tableau V-5 : Les compositions massiques du distillat imposé de la colonne V-603.....	- 38 -
Tableau V-6 : Compositions massiques de l'alimentation.....	- 38 -
Tableau V-7 : Compositions massiques du résidu après calcul.	- 39 -
Tableau V-8 : Compositions molaires au niveau de la colonne V-603.....	- 40 -
Tableau V-9 : Variation du nombre d'étage en fonction des compositions du distillat.....	- 48 -
Tableau V-10 : Variation du taux de reflux en fonction des compositions du distillat.	- 49 -

Résumé

L'objectif de ce travail est de proposer une solution technique visant à améliorer la qualité du méthanol du grade A au grade IMPCA pour répondre aux normes de production internationale.

Le méthanol produit actuellement au niveau du complexe CP1Z est de grade A. Désormais, cette qualité de produit ne satisfait plus les exigences du marché international visant toujours une pureté plus élevée en méthanol pour des applications spécifiques.

La solution envisagée consiste à installer une colonne de distillation supplémentaire qui aura pour objectif d'atteindre un taux de pureté plus important. L'étude de la faisabilité de cette solution est réalisée à l'aide de l'outil de simulation Hysys version 11.

Les résultats de la simulation montrent que l'option envisagée est techniquement réalisable. Les taux de pureté du méthanol obtenu répondent bien aux exigences de la norme IMPCA.

Les mots clés :

Méthanol, grade IMPCA , complexe CP1Z , simulation Hysys version 11

Abstract

The objective of this work is to propose a technical solution for the improvement of the quality of methanol from grade A to IMPCA grade to meet international production standards.

Currently, the methanol produced at the CP1Z complex is of grade A. However, this quality no longer satisfies the international market requirements, which consistently demand higher purity methanol for specific applications.

The proposed solution involves installing an additional distillation column with the goal of achieving a higher purity rate. The feasibility study of this solution is conducted using Hysys version 11 simulation tool.

The simulation results show that the proposed option is technically feasible. The purity levels of the obtained methanol meet the IMPCA standard requirements.

Keywords :

Methanol, IMPCA grade , CP1Z complex , Hysys version 11 simulation

ملخص

الهدف من هذا العمل هو اقتراح حل تقني لتحسين جودة الميثانول من الدرجة A إلى درجة IMPCA من أجل تلبية معايير الإنتاج الدولية .

الميثانول المنتج حاليًا في مجمع CP1Z من الدرجة A. لم تعد جودة المنتج هذه تلبية متطلبات السوق الدولية للحصول على درجة نقاء أعلى للميثانول لتطبيقات محددة.

يتمثل الحل المقترح في تركيب وحدة تقطير إضافية لتحقيق مستوى أعلى من النقاء. تمت دراسة جدوى هذا الحل باستخدام أداة المحاكاة Hysys.

تُظهر نتائج المحاكاة أن الخيار المقترح قابل للتنفيذ من الناحية التقنية، بحيث أن معدلات نقاء الميثانول المحصل عليها تلبية جيدًا متطلبات معيار IMPCA.

الكلمات الدالة :

الميثانول , درجة IMPCA , مجمع CP1Z , محاكاة HYSYS الإصدار 11 .

Table des matières

Dédicaces.....	i
Remerciements	ii
Liste des figures.....	iii
Liste des tableaux	v
Résumé	vi
Introduction Générale.....	- 1 -
Chapitre I : Méthanol, propriétés et caractéristiques.....	- 3 -
I.1 Introduction.....	- 3 -
I.2 Généralités	- 3 -
I.2.1 Etiquetage	- 3 -
I.2.2 Utilisations.....	- 4 -
I.3 Propriétés physiques et chimiques	- 4 -
I.3.1 Propriétés physiques	- 4 -
I.3.2 Propriétés chimiques	- 5 -
I.4 Grades du méthanol	- 6 -
I.4.1 Spécification IMPCA	- 7 -
Chapitre II : Description du procédé de fabrication du méthanol	- 8 -
II.1 Introduction.....	- 8 -
II.2 Procédé de fabrication du méthanol raffiné.....	- 8 -
II.2.1 Distribution du gaz naturel (Section 100)	- 8 -
II.2.2 Reforming catalytique (Section 200).....	- 9 -
II.2.3 Refroidissement et élimination de l'eau (Section 300)	- 10 -
II.2.4 La compression du gaz synthèse (Section 400).....	- 11 -
II.2.5 Synthèse du méthanol (Section 500)	- 12 -
II.2.6 Distillation du méthanol brut (Section 600)	- 13 -

II.2.7	Système de production de la vapeur (Section 700)	- 14 -
Chapitre III : Rappel des principales notions théorique		- 16 -
III.1	Introduction	- 16 -
III.2	Notions fondamentales.....	- 16 -
III.2.1	Description de la colonne de distillation	- 17 -
III.2.2	Lois fondamentales relatives à la distillation	- 19 -
III.2.2.1	Lois de la conservation de la matière	- 19 -
III.2.2.1.1	Bilan de matière global	- 20 -
III.2.2.1.2	Bilan matière de la zone de rectification	- 21 -
III.2.2.1.3	Bilan matière de la zone d'épuisement	- 21 -
III.2.2.2	Lois thermodynamiques fondamentales.....	- 22 -
III.2.2.2.1	Loi de DALTON.....	- 22 -
III.2.2.2.2	Loi de Raoult	- 22 -
III.2.2.2.3	Notion de volatilité.....	- 22 -
III.2.2.3	Taux de reflux optimal	- 23 -
III.3	Dimensionnement de la colonne	- 24 -
III.3.1.1	Hauteur de la colonne.....	- 24 -
III.3.1.2	Nombre de plateaux	- 25 -
III.3.1.3	Diamètre de la colonne.....	- 25 -
Chapitre IV : Simulation avec HYSYS		- 27 -
IV.1	Introduction	- 27 -
IV.2	Utilisation de HYSYS	- 28 -
IV.2.1	Modèle thermodynamique.....	- 29 -
IV.2.1.1	Équations d'état.....	- 29 -
IV.2.1.2	Modèles d'activités	- 31 -
IV.3	Présentation du simulateur Aspen HYSYS	- 33 -
IV.3.1	L'environnement dans « Aspen HYSYS ».....	- 33 -
IV.3.1.1	Environnement « Properties Environment »	- 33 -
IV.3.1.2	Environnement « Simulation Environment ».....	- 34 -

IV.3.2	Les notions de « Stream », « Unit Operation » et « Flowsheet »	- 34 -
IV.3.3	Fonctionnement de Aspen HYSYS	- 34 -
Chapitre V : Simulation et interprétation des résultats.....		- 35 -
V.1	Introduction.....	- 35 -
V.2	Paramètres de la deuxième colonne V-602.....	- 35 -
V.3	Simulation de la troisième colonne.....	- 37 -
V.3.1	Méthodologie et Protocole.....	- 37 -
V.3.1.1	Simulation d'une troisième colonne pour une charge 14000 kg/h.....	- 37 -
V.3.1.2	Simulation avec la fonction « Shortcut-column ».....	- 40 -
V.3.1.2.1	Définition de la liste des constituants et du modèle thermodynamique-	41 -
V.3.1.2.2	Définition des différents débits	- 42 -
Conclusion générale et recommandations.....		- 52 -
Bibliographie.....		- 53 -

Introduction Générale

Le méthanol est un alcool simple ayant un rôle essentiel dans divers secteurs industriels. Il est utilisé comme matière première pour fabriquer des produits chimiques comme le formaldéhyde, l'acide acétique et le MTBE, ainsi que pour produire du biodiesel. De plus, il constitue une alternative aux carburants fossiles sous forme de méthanol pur ou de diméthyle éther (DME) et est utilisé dans la production de gaz de synthèse pour la fabrication d'hydrogène et d'autres produits chimiques.

En 2023, la production mondiale de méthanol a été estimée à environ 110 millions de tonnes par an, avec des pays comme la Chine, les États-Unis, l'Arabie Saoudite et l'Iran comme principaux producteurs. La Chine, en particulier, consomme environ 60% de la production mondiale. Le marché mondial du méthanol, évalué à environ 37 milliards de dollars en 2020, devrait atteindre 54 milliards de dollars d'ici 2025, avec un taux de croissance annuel composé (CAGR pour Compound Annual Growth Rate) de 7,8%.

Le méthanol de grade IMPCA (International Methanol Producers and Consumers Association) est une norme internationale garantissant une qualité élevée, essentielle pour des applications industrielles critiques. Cette norme assure que le méthanol est suffisamment pur pour être utilisé dans des procédés sensibles et des industries spécialisées.

En ce qui concerne l'économie algérienne, notre pays produit du méthanol principalement à partir du gaz naturel, notamment dans les installations de production de méthanol à Arzew, avec une capacité de production de 1000 tonnes par jour. Les exportations de méthanol, qui génèrent des revenus significatifs pour l'Algérie, contribuent à diversifier ses sources de revenus au-delà du pétrole brut et du gaz naturel. En 2020, les revenus des exportations de produits pétrochimiques, y compris le méthanol, étaient estimés à environ 1 milliard de dollars.

Le développement des capacités de production de méthanol en Algérie favorise la création d'emplois et le développement économique régional. Le méthanol est également utilisé dans les industries locales pour produire des produits chimiques comme le formaldéhyde, soutenant ainsi

le développement industriel interne. Le méthanol de grade IMPCA représente une opportunité économique importante pour l'Algérie, soutenant les revenus d'exportation et le développement industriel.

C'est dans ce contexte que s'inscrit notre travail. Il consiste à étudier les possibilités d'amélioration de la qualité du méthanol produit, en passant de la production du méthanol de grade A (pureté moindre) vers le méthanol IMPCA (pureté élevée). Parmi les solutions envisageables, nous proposons l'installation d'une nouvelle colonne de distillation dans la section 600 dans le but d'obtenir du méthanol plus raffiné en réduisant la fraction de l'éthanol correspondant au méthanol de grade IMPCA. Cette proposition constitue l'objectif de notre travail.

Chapitre I :

Méthanol, propriétés et caractéristiques

I.1 Introduction

Le méthanol est le composé alcoolique le plus simple utilisé comme additif dans les applications industrielles. C'est un produit chimique liquide inflammable, incolore et toxique avec une odeur insignifiante. Il est utilisé dans diverses industries telles que l'automobile, la construction, l'électronique, l'emballage, les produits pharmaceutiques, les peintures et revêtements, etc.

Le « marché mondial du méthanol » est segmenté en fonction des produits dérivés, du secteur des utilisateurs finaux et de la géographie. Sur la base des dérivés, le marché du méthanol est segmenté en formaldéhyde, acide acétique, méthanol en oléfines (MTO) / méthanol en propylène (MTP), éther méthyltertiobutylique (MTBE), méthacrylate de méthyle (MMA), biodiesel (mélange d'essence), éther diméthylique (DME) et autres.

I.2 Généralités

Le méthanol (ou alcool méthylique, carbinol, alcool de bois, naphte de bois ou esprit de bois) est un composé organique de formule : CH_3OH (souvent abrégé en MeOH). C'est le plus simple des alcools. Il se présente sous la forme d'un liquide léger.

I.2.1 Etiquetage

L'étiquetage d'un produit chimique est d'une importance capitale car il résume toutes les informations dont le manipulateur de ce produit a besoin. L'étiquette du méthanol est représentée par la figure ci-dessous.



Figure I-1 : Etiquette du méthanol.

I.2.2 Utilisations

Le méthanol est utilisé comme :

- matière première pour la fabrication de l'aldéhyde formique et de l'acide acétique ;
- agent de méthylation en synthèse organique pour la fabrication de nombreux dérivés méthyliques : méthacrylates, téréphtalates, amines, éthers-oxydes, halogénures ;
- solvant dans l'industrie des peintures, vernis, encres, colorants, adhésifs, films ;
- agent d'extraction en chimie organique (purification des essences, des huiles, des graisses, des produits pharmaceutiques) ;
- constituant de carburants spéciaux.

I.3 Propriétés physiques et chimiques

La manipulation et l'utilisation d'une substance chimique quelconque doit d'abord passer par la connaissance de ses propriétés physiques et chimiques.

I.3.1 Propriétés physiques

Le méthanol est un liquide mobile, il est miscible à l'eau, le mélange se faisant avec dégagement de chaleur et contraction, et à la plupart des solvants organiques (alcools, éthers, cétones...).

Il dissout les graisses et un grand nombre de matières plastiques et de sels minéraux. Cela fait de lui un meilleur solvant que l'éthanol.

Tableau I-1 : Propriétés physiques du méthanol.

Nom de la substance	Détails	
Méthanol	Formule	CH ₄ O
	N° de CAS	67-56-1
	Etat physique	Liquide
	Masse molaire	32.04
	Point de fusion	-97.8 °C
	Point d'ébullition	64.5 °C
	Densité	0.7915
	Densité Gas/vapeur	1.11
	Pression de vapeur	3.8 kPa à 0°C 12.3 kPa à 20°C 34.4 kPa à 40°C
	Indice d'évaporation	6.3
	Point d'éclaire	12°C en coupelle fermé
	Température d'auto inflammation	464°C
	Limite d'explosivité ou d'inflammabilité (en volume % d'air)	Limite inférieure 6.7% Limite supérieure 36.5%

I.3.2 Propriétés chimiques

Dans les conditions normales d'emploi, le méthanol est un produit chimiquement stable. Il possède les propriétés générales des alcools primaires (réactions d'oxydation, de déshydrogénation, de déshydratation et d'estérification).

La mobilité de son groupe hydroxyle étant la plus élevée de la série, sa capacité réactionnelle est particulièrement grande.

Une oxydation brutale (par exemple combustion) le transforme en dioxyde de carbone et eau, alors qu'une oxydation ménagée conduit à l'aldéhyde formique, puis à l'acide formique.

I.4 Grades du méthanol

Les principaux grades du méthanol sont les suivants :

- Le méthanol de grade AA : c'est le produit le plus pur, avec des teneurs particulièrement faibles en éthanol (10 ppm max).
- Le méthanol de IMPCA ; c'est un produit très pur et plus commercialisé depuis 2015 avec des conditions très sévères pour des teneurs faibles en éthanol (50 ppm max).
- Le méthanol de grade A : généralement utilisé comme solvant.
- Le méthanol de grade C : pour l'alcool du bois, utilisé comme dénaturant.

Tableau I-2 : Conditions de chaque spécification

Qualité	Carburant	Grade A	Grade AA	IMPCA
Purification du méthanol (%pds) mini	95	99.85	99.85	99.85
Densité (20°/20°)	/	0.7928	0.7928	0.843
Ethanol (ppm) max	/	100	10	50
Acétone et aldéhyde (ppm)	/	<30	<30	<30
Acétone (ppm) max	/	<30	<20	<30
H₂O (ppm%) max	<1	0.15	0.1	0.1
Acide acétique (ppm)	/	30	30	30
Résidu non volatil %(mg/l) max	/	10	3	8
Chlorures (mg/kg) max	/	1	0.3	0.5
Sulfures (mg/kg) max	/	/	/	0.5
Test KMnO₄ a 15°C (min)	/	75	60	60
Fer (mg/kg)	/	0.1	0.075	0.1
Couleur (échelle pt-Co) max	/	5	5	5
Test de permanganate à 15-18°C) min	/	30	30	60

I.4.1 Spécification IMPCA

IMPCA est une association de compagnies qui sont actives dans le marché international du méthanol. Fondée en 1987, l'adhésion est ouverte aux entreprises actives dans la production, la commercialisation ou consommation pour usage en tant que matière première ou autres, ainsi qu'aux prestataires de services de cette industrie.

IMPCA s'engage à atteindre des objectifs de communication et de partage de l'information, se fait par des conférences thématiques bien préparées. Ces dernières ont lieu en Europe, les pays du sud-est de l'Asie, et aux États-Unis.

IMPCA maintient une spécification de référence mondiale du méthanol, ainsi qu'une méthode d'échantillonnage du méthanol et génère un intérêt académique pour les activités liées à l'industrie du méthanol.

L'évolution du marché (développement d'usines des zones isolées, nécessité de transporter le méthanol par navires, augmentation des quantités échangées) a permis à IMPCA de reconsidérer les spécifications déjà disponibles. Il y a quelques années, les consommateurs devaient acheter principalement selon la célèbre norme ASTM 1152. Mais ASTM qui veut dire « American Standard Test Method » est basée seulement sur les échanges faits sur le sol américain ou les moyens de transport sont principalement des wagons-citernes ferroviaires ou routiers, ou des barges sur des rivières.

IMPCA a évité de créer un méthanol de « second grade » ou influencer la production et la compétition en mettant des limites trop marginales. L'objectif était d'essayer de parvenir à un certain consensus entre les producteurs et les commerçants qui souhaitent une spécification aussi large que possible et les consommateurs qui souhaitent un cahier des charges aussi strict que possible.

Chapitre II :

Description du procédé de fabrication du méthanol

II.1 Introduction

Le méthanol est un composé synthétisé principalement à partir du gaz de synthèse qui est un mélange d'hydrogène et de monoxyde de carbone. Ce gaz de synthèse est le produit du vaporeformage du gaz Naturel.

L'unité du méthanol de la zone industrielle d'Arzew a une capacité de production de 300 T /J avec un apport de CO₂ de 340 T/J. Le procédé utilisé pour la synthèse du méthanol par réaction d'hydrogène sur l'oxyde de carbone (CO) et l'acide carbonique est développé avec plus de détails dans les parties qui suivent.

II.2 Procédé de fabrication du méthanol raffiné

Le complexe de production du méthanol est constitué de sept sections :

100, 200, 300, 400, 500,600 et 700.

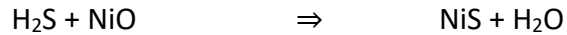
II.2.1 Distribution du gaz naturel (Section 100)

Le gaz naturel provenant de la branche RTO, chargée du transport des hydrocarbures par canalisation de la région ouest, est à la pression de 30 bars. Il passe ensuite à travers le séparateur (V106) pour éliminer toutes les traces des hydrocarbures liquides. Le gaz naturel sortant de ce séparateur est réparti et utilisé comme suit :

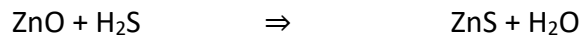
- Gaz combustible dans le four de reforming PICV 105 (27,5 bars).
- Gaz combustible pour les brûleurs auxiliaires PICV 102 (3,5 bars) et pour brûleurs principaux PICV 103 (8 bars).

- Gaz de blinking (T651A) pour le bac de pré-stockage, Gaz de blinking (T603) pour bac souterrain et gaz de pilotes PICV 104 (1,3 bars).

Le gaz du processus doit passer par un désulfateur V105, pour éviter toute altération du catalyseur (NiO) du four de reforming suivant la réaction de destruction :



Le catalyseur est à base de zinc, la réaction de la désulfuration et la suivante :



400°C

La teneur limite du soufre dans le gaz naturel traité ne doit pas dépasser 0.5 ppm.

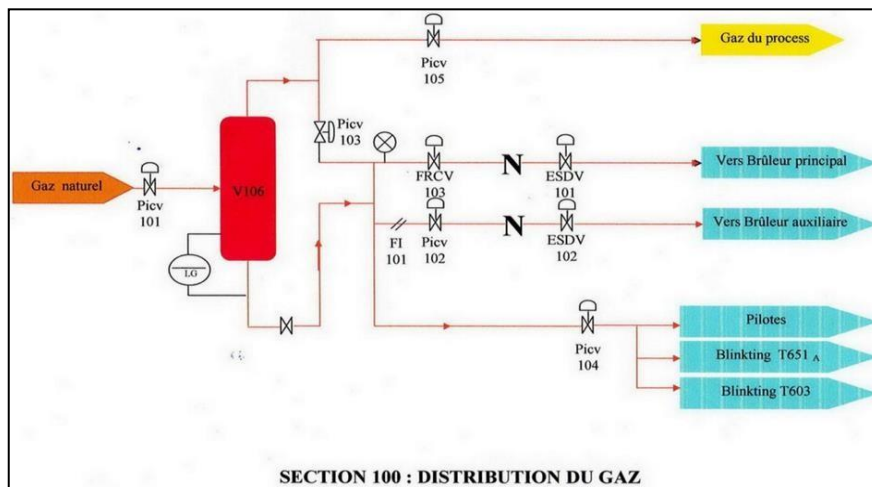


Figure II-1 : Distribution du Gaz Naturel [3].

II.2.2 Reforming catalytique (Section 200)

La vapeur surchauffée est mélangée avec le gaz désulfuré pour alimenter ensuite le four à 360°C. Ce mélange passe à l'intérieur de 168 tubes verticaux où la réaction se déroule sur un catalyseur à base de Nickel NiO.

60 brûleurs sont installés verticalement dans le four pour fournir la chaleur nécessaire pour la réaction endothermique.

Le gaz produit sort du four à 20 bars et à une température de 850°C en fonction de l'âge du catalyseur. Il est composé principalement d'hydrogène, de dioxyde de carbone, de méthane et de la vapeur d'eau.

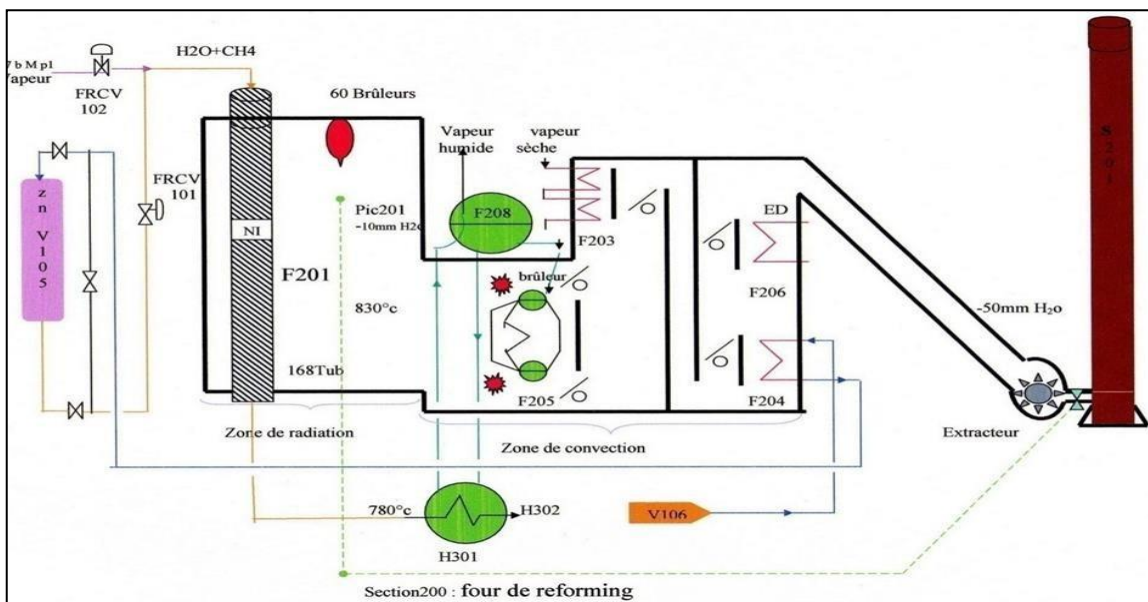
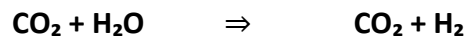
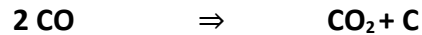
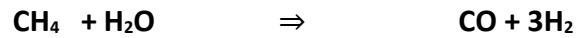


Figure II-2 : Reforming Catalytique [3].

II.2.3 Refroidissement et élimination de l'eau (Section 300)

C'est la section de refroidissement et de séparation de l'eau. Le gaz de synthèse fabriqué passe par trois échangeurs. Il passe ensuite par trois séparateurs pour éliminer l'eau condensée. Le gaz de synthèse sort de cette section pour être dirigé vers la section 400 avec une pression de 17 bars et une température de 35°C.

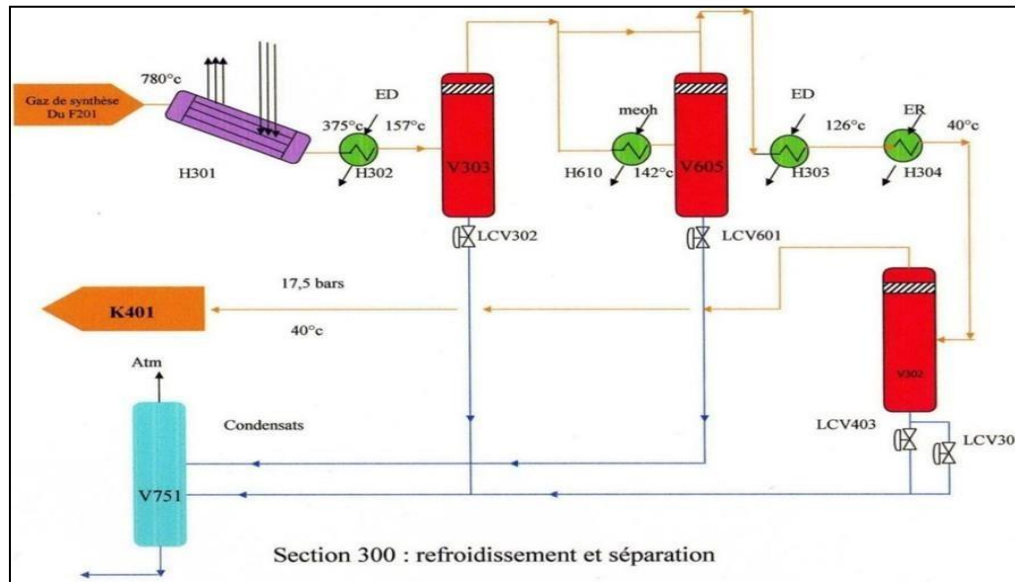


Figure II-3 Refroidissement et Élimination de l'eau [3].

II.2.4 Compression du gaz de synthèse (Section 400)

Le gaz de synthèse final est comprimé de 17 bars à 50 bars dans le compresseur centrifuge (K401) à deux étages HP et BP. Ce compresseur est entraîné directement par une turbine à vapeur HP (80 bars).

Le gaz sortant du compresseur K401 est mélangé avec le gaz de purge sortant du séparateur V502 de méthanol brut à une température de 40°C.

Le mélange passe dans un compresseur de recirculation (K402) où il est comprimé à une pression de 51 bars et une température de 76,5°C. Ce compresseur est entraîné par une turbine MP (25 bars).

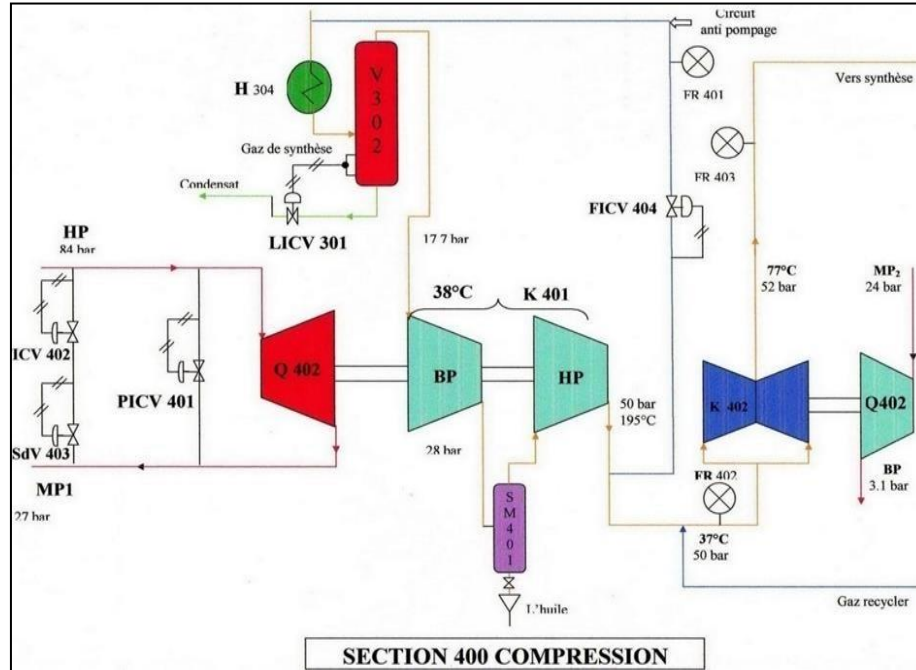


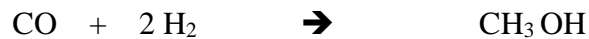
Figure II-4 : Station de compression du gaz de synthèse [3].

II.2.5 Synthèse du méthanol (Section 500)

La boucle de synthèse est la section où une partie du gaz est convertie en méthanol.

Le gaz de synthèse H_2 , CO , CO_2 sortant du compresseur K402 a 52 bars et $76.5^\circ C$ s'écoule vers l'échangeur H501 où il est réchauffé jusqu'à $245^\circ C$. Le gaz préchauffé pénètre dans le réacteur V501 à une pression de 52 bars.

Le V501 est un récipient cylindrique vertical contenant 4 lits remplis de catalyseur à base de cuivre où se passe la réaction de synthèse du méthanol.



Une grande partie du méthanol est condensée. Le mélange méthanol gaz-liquide s'écoule vers le séparateur de méthanol V502 où le liquide est séparé du gaz qui n'a pas réagi. Une quantité de gaz est envoyée vers le compresseur de recirculation K402. Une autre partie est envoyée vers le compresseur K401 sous forme de gaz d'étanchéité.

Le méthanol brut obtenu (contient 20% d'eau et 80% méthanol) s'écoule vers le bac de pré-stockage T651.

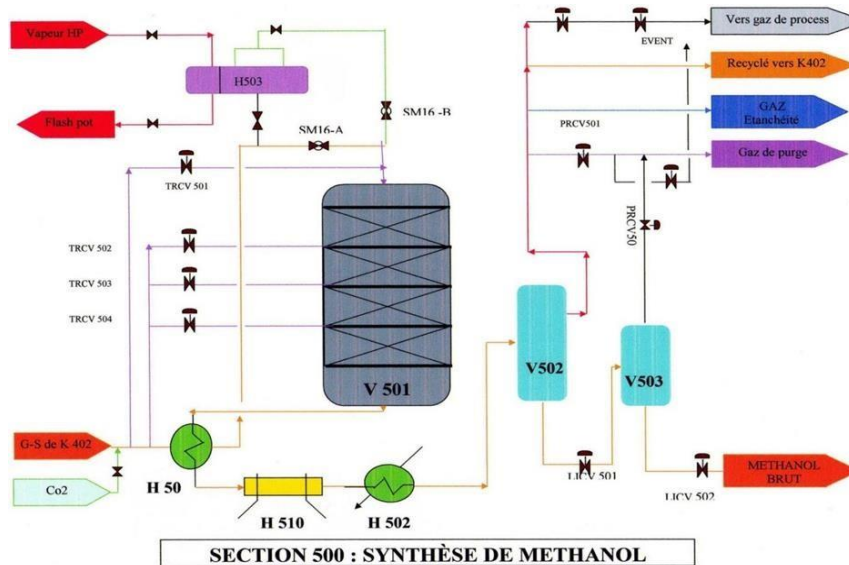


Figure II-5 : Synthèse du méthanol [3].

II.2.6 Distillation du méthanol brut (Section 600)

Le méthanol brut est destiné à trouver 02 colonnes V601 et V602.

Les gaz résiduaire (CO₂, CO, H₂, CH₄, N₂) sont extraits au niveau de la 1^{ère} colonne (V601) composé de 48 plateaux

Après l'élimination des gaz incondensables au niveau de la 1^{ère} colonne (V601), le produit de fond de cette dernière est acheminé vers la 2^{ème} colonne (V 602) composé de 63 plateaux à clapet fixe où les traces d'eau sont enlevées pour obtenir un méthanol raffiné qui va être récupéré ou sommet de la colonne (au niveau du plateau 59) où la teneur en eau est inférieure à 0.15%. C'est le méthanol grade A.

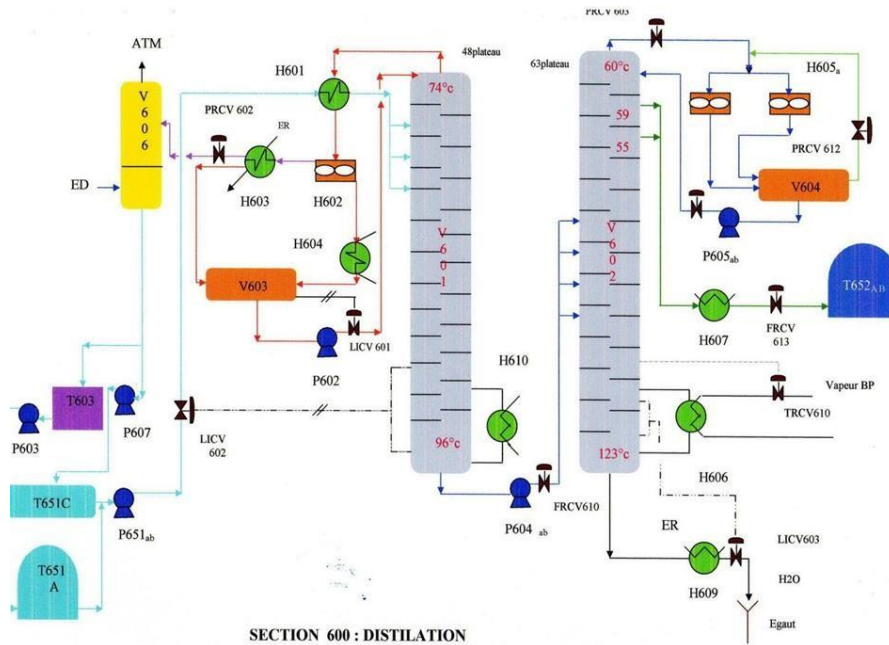


Figure II-6 Distillation du méthanol brut [3].

II.2.7 Système de production de la vapeur (Section 700)

Le système de production de la vapeur, **Figure II-7**, est un système qui fournit la force motrice de l'unité pour les principales machines tournantes telles que les turbines et les compresseurs.

Les vapeurs produites :

HP : haute pression (80 bars).

MP : moyenne pression MP1 (30 bars) et MP2 (24 bars).

BP : basse pression (3,5 bars).

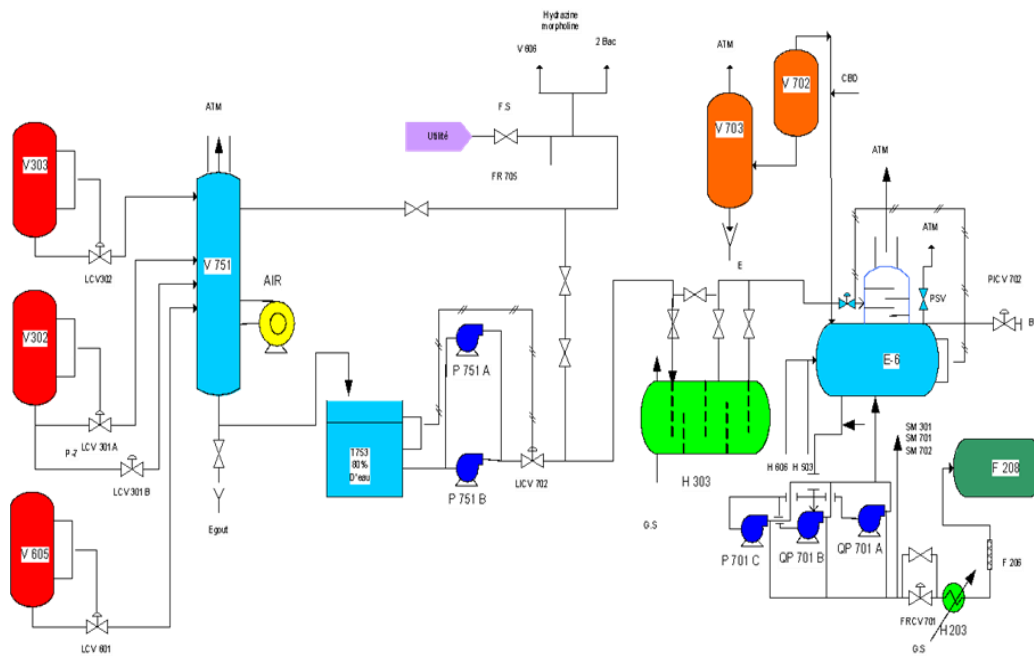


Figure II-7 : Système de production de la vapeur [3].

Chapitre III :

Rappel des principales notions théorique

III.1 Introduction

La distillation, souvent appelée rectification, est la technique la plus importante pour séparer les mélanges de fluides dans les industries de transformation. Environ 95 % de toutes les séparations de liquides sont effectuées par des procédés de distillation. Ce rôle exceptionnel joué par la distillation repose sur le fait que la distillation est la seule technique de séparation capable de fractionner un mélange de fluides en ses constituants purs.

La rectification utilise un principe très simple qui se compose de trois étapes. Premièrement, la génération d'un système biphasé, deuxièmement, le transfert de masse à travers l'interface et troisièmement, la séparation des deux phases. Ce principe est très efficace et, par conséquent, il est également appliqué à d'autres procédés de séparation. Cependant, dans la plupart des séparations alternatives, par exemple, l'absorption, l'adsorption et l'extraction, le système à deux phases est créé par l'ajout d'une substance externe (solvant) qui doit être éliminée plus tard dans un processus de séparation supplémentaire.

III.2 Notions fondamentales

La distillation est un procédé de séparation d'un mélange de constituants liquides dont le but est d'obtenir une phase vapeur riche en constituants les plus volatils appelée distillat et une phase liquide riche en constituants les non volatils appelée résidu en utilisant comme agent de séparation la chaleur et qui s'effectue dans une colonne de distillation.

III.2.1 Description de la colonne de distillation

C'est un appareil cylindrique comprenant des éléments de contact entre la phase vapeur et la phase liquide appelés « plateaux » ; il existe plusieurs types de plateaux dont les plus efficaces sont des plateaux à :

- Clapets : les clapets sont directement emboutis sur le plateau. Cette technologie basée sur une structure simple permet une capacité de production importante à un coût réduit. Elle a une grande efficacité avec une faible perte de charge. Ce type de plateau est très utilisé dans les industries pétrochimiques.
- Cloches : ce type est utile pour les applications avec une faible charge, nécessitant une grande flexibilité, avec un rendement stable.
- Perforés : c'est une structure simple avec un investissement réduit. Ils sont caractérisés par une faible perte de charge pour une capacité de production et une efficacité plus élevée.



Figure III-1 : Différents types de plateaux.

Le procédé comprend plusieurs compartiments, on cite le condenseur qui assure la condensation des produits les plus volatils (vapeur de tête) au sommet de la colonne. Le rebouilleur ou le four placé en bas de la colonne pour assurer la vaporisation des produits plus volatils. À l'entrée de la colonne, il peut y avoir un préchauffeur pour ramener le liquide à une température exigée par le procédé. La colonne est constituée essentiellement de 3 parties :

- Zone de flash : Lieu de l'injection de la charge (mélange, alimentation).
- Zone de concentration : Zone dans laquelle se trouvent les vapeurs pour être condensées pour obtenir le distillat.
- Zone d'épuisement : Zone dans laquelle le résidu se vaporise dans le but de récupérer les produits légers.

Le fonctionnement normal de la colonne de rectification pour l'obtention d'un distillat et d'un résidu avec des compositions voulues dépend principalement de l'état de la charge et par conséquent, du lieu d'alimentation.

Généralement, la charge peut être envoyée à la colonne à :

1. l'état liquide.
2. l'état vapeur.
3. l'état liquide- vapeur (mélange)

Si la charge est à l'état liquide, l'alimentation doit se faire dans la partie supérieure de la colonne.

Si elle est à l'état liquide vapeur, l'alimentation se fait dans la partie médiane de la colonne.

Le lieu exact de l'alimentation de la colonne peut être déterminé en calculant le nombre de plateaux de la zone de rectification et de la zone d'épuisement.

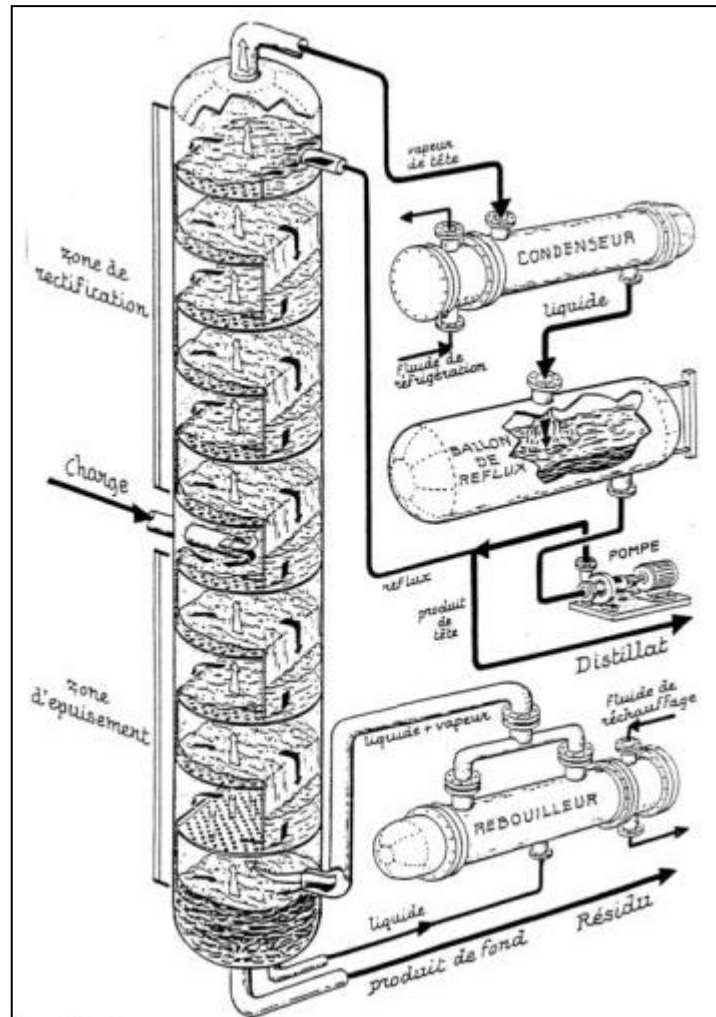


Figure III-2 : Schéma d'une colonne de distillation industrielle.

III.2.2 Lois fondamentales relatives à la distillation

Il est nécessaire de développer certaines lois fondamentales pour bien comprendre l'opération unitaire de distillation. Ces lois sont basées sur les principes de la conservation de la masse et de l'énergie ainsi que d'autres considérations, généralement thermodynamiques.

III.2.2.1 Lois de la conservation de la matière

Le bilan de matière est basé sur un principe universel qui stipule que la matière ne peut pas être créée d'elle-même et ne peut pas être détruite.

III.2.2.1.1 Bilan de matière global

L'application du bilan de matière autour d'une colonne de rectification avec une alimentation « F », un distillat « D » en tête de colonne et un soutirât « S » en bas de colonne, exprimée en débit massique ou molaire, avec des compositions des différents constituants dans les différentes zones, permet d'écrire :

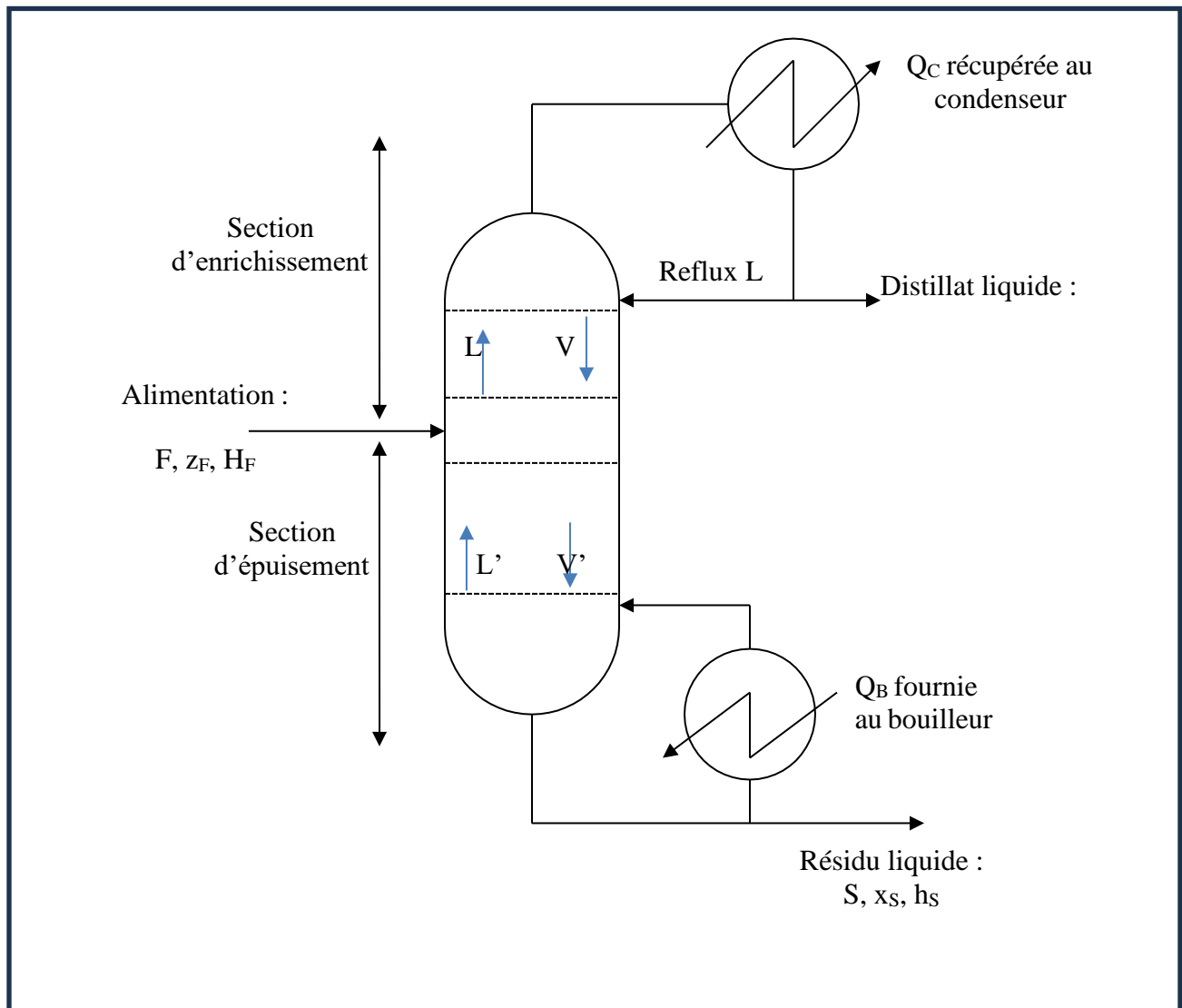


Figure III-3 : Flux de matière intervenant dans une colonne de distillation.

$$F = D + S \quad (\text{III-1})$$

On peut aussi écrire un bilan pour chaque constituant « i » :

$$F z_i^F = D x_i^D + S x_i^S \quad (\text{III-2})$$

L'équation obtenue sert à calculer R et D , si la concentration du constituant « i » dans le distillat et dans le résidu est connue.

III.2.2.1.2 Bilan matière de la zone de rectification

L'application du bilan de matière dans la zone de rectification permet d'écrire :

$$V = L + D \quad (\text{III-3})$$

On définit un taux de reflux par l'expression :

$$Rf = \frac{L}{D} \quad (\text{III-4})$$

D'où

$$V = (Rf + 1) D \quad (\text{III-5})$$

Avec :

L : débit du liquide retourné en tête

V : débit de vapeur sortant de la colonne

III.2.2.1.3 Bilan matière de la zone d'épuisement

Le bilan de matière dans la zone d'épuisement permet d'aboutir à :

$$L' = V' + S \quad (\text{III-6})$$

$$L' x'_{n+1} = V' y'_{n,i} + S x'_s \quad (\text{III-7})$$

La résolution de cette dernière par rapport à X_{n+1} , i permet d'obtenir l'équation de concentration de la zone d'épuisement :

III.2.2.2 Lois thermodynamiques fondamentales

La partie qui suit développe les principales lois thermodynamiques intervenant dans l'opération de distillation.

III.2.2.2.1 Loi de DALTON

Cette loi permet d'établir une relation entre la pression exercée par un constituant gazeux et la pression totale exercée par l'ensembles des constituants d'un mélange gazeux.

Considérons une phase vapeur composée de constituants auxquels on peut appliquer la loi des gaz parfaits, alors que la pression partielle d'un constituant P_i est proportionnelle à la pression du système P et à sa concentration molaire y_i :

$$P_i = P y_i \quad (\text{III-8})$$

III.2.2.2.2 Loi de Raoult

Cette loi est applicable aux liquides. Considérons une phase liquide composée de constituants entièrement miscibles, on conçoit aisément que la tendance des molécules d'un constituant à s'échapper de la phase liquide est proportionnelle à la concentration molaire de ce constituant en phase liquide. D'après la loi de RAOULT, la pression partielle P_i d'un constituant « i » est égale au produit de sa tension de vapeur P_i° à l'état pur par sa concentration molaire en phase liquide x_i .

$$P_i = P_i^\circ x_i \quad (\text{III-9})$$

III.2.2.2.3 Notion de volatilité

La volatilité (α) peut être définie comme le rapport de la fraction molaire de la phase gazeuse (y) sur la fraction molaire de la phase liquide (x) :

$$\alpha = \frac{y}{x} \quad (\text{III-10})$$

Le concept de volatilité relative est utilisé pour caractériser la facilité de séparation d'un mélange par distillation. La volatilité relative est définie par :

$$\alpha = \frac{\frac{y_a}{x_a}}{\frac{y_b}{x_b}} \quad (\text{III-11})$$

Tel que :

a : le constituant le plus volatil

b : le constituant le moins volatil

Une distillation est considérée comme un bon procédé de séparation si la volatilité relative est supérieure à 1,05.

III.2.2.3 Taux de reflux optimal

À partir du taux de reflux opératoire choisi en tête, l'étude du procédé de rectification montre qu'à chaque valeur du taux de reflux correspond un nombre fini de plateaux théoriques et que ce nombre diminue quand le taux de reflux s'accroît.

Pour ces calculs approximatifs, on peut utiliser la formule proposée par GILLILAND :

$$\frac{Rf_{Opt} - Rf_{min}}{Rf_{Opt} + 1} = 0.1 - 0.33 \quad (\text{III-12})$$

Pour le rapport moyen, on aura :

$$Rf_{Opt} = 1.3 * Rf_{min} + 0.3 \quad (\text{III-13})$$

III.3 Dimensionnement de la colonne

Le dimensionnement de chaque plateau est fait de manière à atteindre les objectifs suivants :

- Capacité : On recherche une capacité élevée pour la vapeur et/ou pour le liquide suivant la demande. De même, on recherche la flexibilité et l'adaptation aux hautes et faibles fluctuations des charges liquides et vapeurs.
- Pertes de charge : une perte de charge faible est nécessaire pour réduire le gradient de température entre le sommet et le fond de la colonne (on chauffe moins en fond de colonne). Une perte de charge élevée est généralement associée à un dimensionnement non économique.
- Efficacité : Une efficacité élevée est l'objectif premier de la performance du plateau. Plus le contact est meilleur sur un intervalle de capacité assez grand, plus l'efficacité sur cet intervalle sera élevée

Les conditions de marche d'une colonne sont : pression, température et taux de reflux en fonction du nombre d'étages. Les dimensions d'une colonne sont :

III.3.1.1 Hauteur de la colonne

Cette hauteur est liée au nombre de plateaux que l'on doit installer à l'espacement que l'on doit prévoir entre chacun d'eux.

La hauteur totale de la colonne est calculée par la formule suivante :

$$HT = H1 + H2 + H3 + H4 + H5 + H5 \quad (\text{III-14})$$

- H1 : la distance entre le sommet est le premier plateau de la zone de rectification.
- H2 : la hauteur de la zone de rectification.
- H3 : la hauteur de la zone d'alimentation.
- H4 : la hauteur de la zone d'épuisement.

- H5 : la distance entre le premier plateau de la zone d'épuisement et le fond de la colonne. Puisque la hauteur de la colonne dépend de la distance entre les plateaux, mais la distance entre les plateaux dépend aussi du diamètre de la colonne (1-1.5) m

III.3.1.2 Nombre de plateaux

Le nombre d'étages est fonction du taux de reflux, ces étages sont également appelés « plateaux théoriques » ces derniers sont déterminés par des méthodes graphiques ou analytiques si le taux de reflux est maximal le nombre de plateau est minimale or le nombre de plateau est maximale

On utilise la formule de FENSKE pour déterminer le nombre de plateau minimale

$$N_{min} + 1 = \frac{1}{\log(\alpha)} \left[\log \left(\frac{x_D}{1-x_D} \frac{1-x_S}{x_S} \right) \right] \quad (\text{III-15})$$

Où :

N_{min} : Nombre minimal de plateaux.

α : Volatilité relative moyenne entre la tête et le pied de colonne ($\alpha = \sqrt{\alpha_D \alpha_S}$).

Le nombre de plateaux théoriques dans la colonne entière où dans chacune des deux zones, peut calculer par l'application de la méthode « GILLILAND ».

$$\frac{N - N_{min}}{N - 1} = f \left(\frac{Rf_{Opt} - Rf_{min}}{Rf_{Opt} - 1} \right) \quad (\text{III-16})$$

III.3.1.3 Diamètre de la colonne

Si la vitesse des vapeurs dans la tour est trop grande (diamètre trop petit) des gouttelettes de liquide peuvent être entraînées d'un plateau à l'autre. En effet, il y'aura un by-pass partiel des 40 plateaux, et l'équilibre n'est pas atteint. Ceci amène à une baisse de l'efficacité de plateaux. Le calcul se fait en prenant le débit de vapeur de tête (distillat + reflux interne), car c'est la zone la plus chargée.

On calcule le diamètre de la colonne à l'aide de l'équation suivante :

$$D = \sqrt{\frac{4 Q}{\pi w}} \quad (\text{III-17})$$

Avec :

- Q : débit des vapeurs qui quittent le sommet de la colonne en m³/s.
- w : la vitesse des vapeurs en m/s.

Chapitre IV :

Simulation avec HYSYS

IV.1 Introduction

La simulation est une branche de l'informatique qui permet de réaliser des calculs très complexes en utilisant des outils appelés « simulateurs ». En génie chimique, les simulateurs les plus utilisés sont : Aspen Hysys, Aspen Plus, ChemCAD, Hysim Pro-II et d'autres. Ces environnements permettent de traduire avec une grande fidélité la réalité des procédés en effectuant des bilans de matière et d'énergie et aussi en prenant en charge les différentes équations et expressions caractéristiques pour chaque phénomène. Ceci permet de dimensionner toute une installation et vérifier son fonctionnement et aussi de prédire les ajustements ainsi que les points à contrôler pour un fonctionnement optimal.

La simulation est définie comme étant la représentation d'un phénomène physique à l'aide de modèles mathématiques simples permettant de décrire son comportement. Autrement dit la simulation permet de représenter par des modèles mathématiques les différents phénomènes de transfert de masse, d'énergie et de quantité de mouvement qui se produisent dans les différentes opérations unitaires [4].

Le modèle mathématique est composé d'une série d'équations développées dans l'objectif de décrire le comportement d'un système donné (opération unitaire : séparation de phases, compression, détente, échange de chaleur ou autre). Ce sont des équations de conservation de masse, d'énergie et de quantité de mouvement. Ces équations peuvent être algébriques ou différentielles [4].

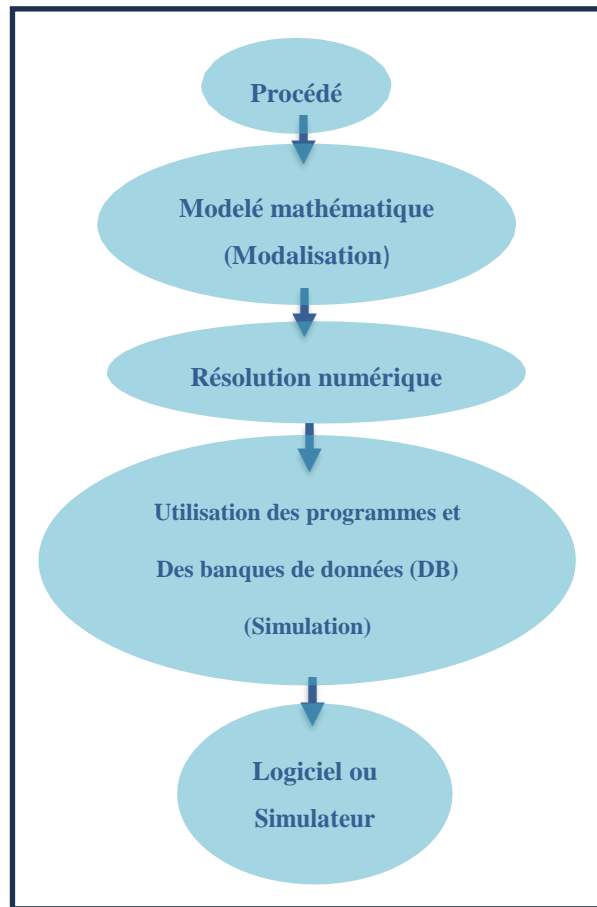


Figure IV-1 : Principales étapes de la simulation.

IV.2 Utilisation de HYSYS

HYSYS est l'abréviation de HYdrocarbon SYStem. Il est conçu pour être utilisé dans le domaine des Hydrocarbures. Son utilisation se fait en plusieurs étapes. La première étape consiste à fournir au logiciel les principales informations telles que les constituants, les conditions physiques, les débits, ...etc. Durant cette étape, on doit aussi spécifier le modèle thermodynamique qui va décrire le comportement des principales variables d'état. A la fin, on doit élaborer un schéma de process pour indiquer les entrées et les sorties de chaque opération unitaire ainsi que les paramètres de fonctionnement de tous les équipements utilisés.

La deuxième étape n'est autre que l'exploitation des résultats obtenus. Une fois la simulation terminée, il est procédé à la vérification de ces résultats pour une éventuelle comparaison avec les données existantes et ensuite procéder à l'analyse des différents scénarios en changeant les différents paramètres.

IV.2.1 Modèle thermodynamique

La modélisation d'un système physique repose sur la connaissance d'un certain nombre de propriétés des corps purs et des mélanges binaires ou complexes.

Ces propriétés servent de base à la détermination des propriétés thermodynamiques, de transfert et des équilibres entre phases. Ainsi la qualité des résultats est directement liée aux données des corps purs et binaires et aux modèles choisis pour représenter le comportement thermodynamique du système considéré.

Le choix du modèle thermodynamique est principalement dicté par le souci de rigueur, de fiabilité et de validité dans le domaine opératoire considéré.

Parmi les modèles thermodynamiques existants, on cite :

- Modèles basés sur les équations d'état.
- Modèles d'activité.
- Modèles hétérogènes.

IV.2.1.1 Équations d'état

Les équations d'état de Redlich-Kwong-Soave (SRK) et Peng Robinson (PR) sont communément utilisées. Elles découlent de l'équation de Vander Waals pour les hydrocarbures légers non-polaire, et améliorent l'équation d'état de Redlich-Kwong (RK).

Les modèles SRK et PR présente mieux les équilibres liquide- vapeur VLE, et sont utilisées pour :

- Les hydrocarbures non polaires légers C1-C4.

- Les hydrocarbures lourds C5+.
- CO, CO₂ et H₂S (jusqu'à 25 % en mole) pour les hydrocarbures légers.
- N₂ et H₂ dans les hydrocarbures légers.

Les équations d'état de SRK et PR sont valides dans les conditions suivantes :

Température de point critique jusqu'aux températures cryogéniques. PR est meilleur dans la région critique.

- PR : $T \geq -456 \text{ °F}$ et $P \leq 15\,000 \text{ psia}$
- SRK : $T \geq -225 \text{ °F}$ et $P \leq 5000 \text{ psia}$

Il existe une multitude d'équations d'état résumées dans le tableau suivant :

Tableau IV-1 : Différentes équations d'état.

EOS	Description
PR	Cette équation est considérée adéquate pour le calcul d'équilibre liquide vapeur des systèmes composés des hydrocarbures. Les améliorations apportées par Hyprotech à cette équation d'état lui permettent d'être très fiable pour une variété de système sur un large domaine de conditions. Elle résout rigoureusement tous les systèmes composés d'une seule phase, biphasique ou un système à trois phases avec haut degré d'efficacité et de précision, et est applicable sur une grande gamme de conditions.
SRK	Ce modèle peut donner des résultats très proches à ceux fournis par PR, mais son intervalle d'application est très limité.
PRSV	L'équation de Peng robinson Stryjet Vera est une modification de PR. Elle permet de faire le calcul d'équilibre pour les systèmes modérément non idéaux.

IV.2.1.2 Modèles d'activités

Les mélanges non idéaux présentent de grands problèmes lors des simulations. Il est alors nécessaire de prédire les coefficients d'activités non idéaux de la phase liquide et les coefficients de fugacité de la phase vapeur. C'est une approche plus empirique que les équations d'états. Pour les solutions idéales, les coefficients seront 1. Ce cas n'arrive pas alors il faut obtenir des valeurs pour ces coefficients.

Les corrélations sont basées sur l'excès d'énergie libre de Gibbs qui représente la non-idéalité d'une solution. Le couplage de cette technique avec l'équation de Gibbs-Duhern permet d'obtenir des valeurs de coefficients d'activité.

Les plus vieux modèles comme Margules et van Laar représentent moins bien l'excès et sont donc plus limités dans leur application.

Les nouveaux modèles comme Wilson, NRTL (Non random two liquid) et UNIQUAC sont plus solides. Ils demandent cependant plus de ressources informatiques pour obtenir un résultat, mais ils donnent de bons résultats dans le cas des mélanges non idéaux tels qu'alcool hydrocarbures en région diluée.

Dans HYSYS, les coefficients binaires proviennent de la collection DECHEMA, Chemistry Data Series. 16 000 coefficients binaires sont répertoriés. On utilise ces coefficients s'ils sont connus. Sinon on évalue les coefficients à l'aide d'UNIFAC (Universal functional activity coefficient) pour les inconnus seulement.

Il existe une multitude des modèles d'activités dans le tableau suivant :

Tableau IV-2 : Différents modèles d'activité.

Modèles d'activités	Description
Margules	La première équation utilisant l'excès d'énergie libre de Gibbs. Pas de fondement théorique au modèle.

<p>Van Laar</p>	<p>La première équation utilisant l'excès d'énergie libre de Gibbs avec un fondement théorique. Calcul très rapide, mais de mauvais résultats avec les hydrocarbures halogénés et les alcools. Attention à l'évaluation des systèmes multi composants. Il a tendance à prédire deux phases liquides même si elles n'existent pas.</p>
<p>Wilson</p>	<p>Proposé par Grant M Wilson en 1964 Le premier modèle d'activité utilisant la composition locale pour dériver l'expression de l'excès d'énergie libre de Gibbs. Une approche thermodynamiquement consistante pour prédire les mélanges multi composants. Représente les systèmes non idéaux à l'exception des électrolytes.</p>
<p>NRTL (Non random two liquid)</p>	<p>Proposé par Renon and Prausnitz en 1968. Extension de Wilson utilise la mécanique statistique et la théorie des cellules liquide pour la structure du liquide. VLE, LLE et VLLE On peut l'utiliser pour les systèmes dilués et pour les systèmes alcool-hydrocarbure</p>
<p>UNIQUAC (Universal Quasi Chemical)</p>	<p>Proposé par Abrams et Prausnitz en 1975 utilise la mécanique statistique la théorie quasi chimique de Guggenheim pour représenter la structure du liquide VLE, LLE et VLLE On l'utilise pour les mélanges contenant Eau, alcools, des nitriles, des amines, des esters, des cétones, des aldéhydes, des hydrocarbures halogénés et les hydrocarbures.</p>
<p>Henry</p>	<p>Basé sur la loi d'Henry, Utilisé lorsque modèle d'activité et non condensable CH₄, C₂H₆, C₂H₄ (éthylène), C₂H₂ (acétylène), H₂, He, Ar, N₂, O₂, NO, H₂S, CO₂, CO.</p>

IV.3 Présentation du simulateur Aspen HYSYS

Dans ce qui suit, nous allons donner une brève présentation de ce logiciel.

IV.3.1 L'environnement dans « Aspen HYSYS »

Après l'ouverture de plusieurs simulations on remarque que « Aspen HYSYS » comporte plusieurs environnements. L'environnement dans ce simulateur est un espace de travail où on peut accéder ou introduire des informations concernant la simulation, ces environnements peuvent être groupés en deux catégories :

- Environnement des propriétés (Properties Environment).
- Environnement de la simulation (Simulation Environment).

IV.3.1.1 Environnement des propriétés « Properties Environment »

Lorsqu'on commence une nouvelle simulation (New Case) dans « Aspen HYSYS », automatiquement on entre dans « Properties Environment ». Dans cet environnement on peut créer, définir ou modifier les principales informations relatives aux constituants au niveau du sous-environnement « The Property Package ».

Le sous-environnement « The Property Package » englobe :

- ❖ La liste des composés purs.
- ❖ Le modèle thermodynamique approprié qui permet de prédire (prévoir) le comportement et les propriétés des mélanges.
- ❖ Les pseudo-composés « Hypotheticals » : ce sont les nouveaux composés chimiques qui n'existent pas dans la banque de données du logiciel et que l'utilisateur peut créer.
- ❖ Les réactions si elles existent.

IV.3.1.2 Environnement « Simulation Environment »

C'est l'environnement principal de la simulation où on trouve le schéma de procédé « Flowsheet » (courants et opérations unitaires). Cet environnement peut contenir d'autres sous-environnements, par exemple :

- ❖ Sous-environnement « Subflowsheet Environment ».
- ❖ Sous-environnement « Column subflowsheet Environment ».

IV.3.2 Les notions de « Stream », « Unit Operation » et « Flowsheet »

Dans Aspen HYSYS on trouve ces notions suivantes :

- ❖ Notion « Streams » : Ce sont des lignes de courant ou des circuits, on distingue deux catégories de « Streams » : - Courant de matière « Material stream » - Courant d'énergie « Energy Stream » Il existe trois types de courants de matières : d'alimentation, de sortie ou intermédiaire (qui permettent la connectivité entre les opérations unitaires).
- ❖ Notion « Unit Operations » ou « Operations » : Ce sont les opérations unitaires qui peuvent être installés dans le « Flowsheet », chacune d'elles avec sa propre icône et ses fenêtres de propriétés.
- ❖ Notion « Flowsheet » ou « PFD » (« Process Flow Diagram ») : C'est la première fenêtre qui apparaît lorsqu'on entre dans « Simulation Environment » où on peut représenter notre procédé sous forme de diagramme. Le PFD est un ensemble d'opérations unitaires connectées par des courants (matière et énergie).

IV.3.3 Fonctionnement de Aspen HYSYS

L'utilisateur doit passer par les étapes suivantes pour réaliser une simulation :

- Spécifier la liste des composés du procédé.
- Choisir un modèle thermodynamique approprié à la liste des composés.
- Etablir le schéma de procédé (Flowsheet ou PFD).
- Spécifier les paramètres nécessaires pour le calcul de chaque opération unitaire.

Chapitre V :

Simulation et interprétation des résultats

V.1 Introduction

Cette étude préconise l'installation d'une nouvelle colonne de distillation dans la section 600 en utilisant le simulateur Aspen HYSYS et de faire une étude de dimensionnement et de calculs de cette colonne dans le but d'obtenir du méthanol plus raffiné en réduisant la fraction de l'éthanol jusqu'à au-delà de 10 ppm correspondant au méthanol de grade IMPCA.

V.2 Paramètres de la deuxième colonne V-602

La deuxième colonne de distillation nommée V-602 localisée dans la section 600 a pour but la séparation du méthanol et l'eau.

La colonne de distillation V-602 est caractérisée par des compositions massiques, des débits massiques, les pressions de fond et du bas de la colonne, etc.

Le tableau ci-dessous montre la composition massique de la charge de la colonne **V-602**.

Tableau V-1 : Composition massique de la charge **V-602**.

Composés	Composition massique de l'alimentation
Méthanol	0.7800
Ethanol	0.0003
Eau	0.2197

Le tableau suivant montre les caractéristiques techniques de la colonne **V-602**.

Tableau V-2 : Caractéristiques techniques de la colonne **V-602**.

V-602	Paramètres
Débit d'alimentation	15 408 kg/h
Débit de reflux	26 580 kg/h
Température du mélange à l'alimentation	82 °C
Pression de top	1.53bars
Pression de fond	1.95bars
Nature de fluide	Méthanol + eau + éthanol
Plateau d'alimentation	17
Pression d'alimentation	4 bars
Le reflux	Total
Type de plateau	Clapet fixe
Nombre de plateaux	63
Diamètre du plateau	2,5 m
Hauteur totale de la colonne	32,42 m
Espace entre les plateaux	0,46 m
Diamètre intérieur	2,54 m

Ce tableau montre les compositions massiques du distillat et du résidu dans la **V-602**.

Tableau V-3 : Compositions massiques dans la colonne V-602.

Composition	Distillat	Résidu
Méthanol	0.9987	0
Ethanol	0.0004	0
Eau	0.0009	1

Le schéma de process simulé avec HYSYS est représenté comme suit :

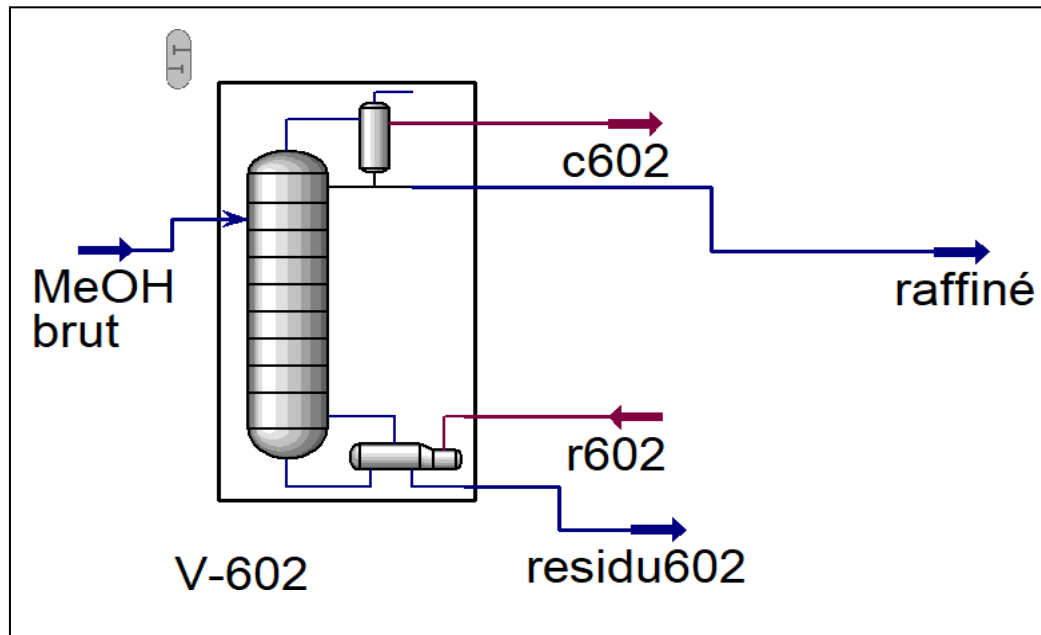


Figure V-1 : Simulation de la Colonne V-602 avec Hysys (flowsheet).

V.3 Simulation de la troisième colonne

Actuellement, il existe seulement deux colonnes de distillation au niveau de la section 600 du « Complexe Méthanol et Dérivés (CP1/Z) » d'Arzew. La simulation de la nouvelle colonne de distillation (troisième colonne) doit se faire avec une méthodologie et un protocole bien précis.

V.3.1 Méthodologie et Protocole

Le protocole de la troisième colonne nommée V-603 est de satisfaire les exigences de la spécification IMPCA. Pour cela, on impose des fractions du distillat suivant cette spécification avec un débit élevé.

V.3.1.1 Simulation d'une troisième colonne pour une charge 14000 kg/h

La charge réelle d'alimentation est de 12030 kg/h. Nous proposons une augmentation de 15% pour atteindre un débit d'alimentation de 14000 kg/h.

1. On suppose que le débit du distillat est de $D=13950\text{kg/h}$ est pour cela le débit du résidu sera $S=50\text{ kg/h}$ par l'équation (III-1).
2. La norme IMPCA impose les spécifications mentionnées dans le tableau suivant.

Tableau V-4 : Compositions du distillat spécifié par la norme IMPCA.

La spécification IMPCA	
Pureté du MeOH (%) max	99.85%
Ethanol (ppm) max	50 ppm
H ₂ O (ppm) max	0.1 ppm

Pour cela les fractions (% massique) du distillat imposé suivant la spécification IMPCA sont comme suit :

Tableau V-5 : Compositions massiques du distillat imposé de la colonne V-603.

Distillat =13950 kg/h	
$x_D(\text{Méthanol})$	0.999960
$x_D(\text{Ethanol})$	0.000040
$x_D(\text{H}_2\text{O})$	0.000000

Ensuite, on calcule les fractions molaires du résidu en utilisant l'équation suivante :

$$x_i^S = \frac{F x_i^F - D x_i^D}{S} \quad (\text{V-1})$$

Les fractions (% massique) du méthanol raffiné (alimentation) sont :

Tableau V-6 : Compositions massiques de l'alimentation.

Alimentation = 14000 kg/h	
$x_F(\text{Méthanol})$	0.998798
$x_F(\text{Éthanol})$	0.000431
$x_F(\text{H}_2\text{O})$	0.000786

On trouve les résultats suivants (en % massique) :

Tableau V-7 : Compositions massiques du résidu après calcul.

Résidu=50 kg/h	
$x_s(\text{Méthanol})$	0.209677
$x_s(\text{Ethanol})$	0.658618
$x_s(\text{H}_2\text{O})$	0.131705

Après la détermination des débits et les fractions, il faut convertir les pourcentages massiques en molaires :

$$x_i = \frac{m_i}{m_T} = \frac{n_i / M_i}{n_T / M_{moy}} \quad (\text{V-2})$$

$$x_i = x'_i \times \frac{M_i}{M_{moy}} \quad (\text{V-3})$$

Avec :

$$M_{moy} = \frac{1}{\sum x_i / M_i} \quad (\text{V-4})$$

Où :

M_{moy} : Masse moléculaire moyenne en (g/moles).

M_i : Masse moléculaire du constituant (i) en (g/moles).

x_i : Fraction massique du constituant (i) en (%).

x'_i : Fraction molaire du constituant (i) en (%).

n_i : Nombre de moles du constituant (i).

n_T : Nombre de moles total du mélange.

m_i : Masse du constituant (i) en kg.

m_T : Masse totale du mélange en kg.

Les résultats obtenus sont comme suit :

Tableau V-8 : Compositions molaires au niveau de la colonne V-603.

	Alimentation	Distillat	Résidu
Méthanol	0.9983	0.999974	0.428379
Ethanol	0.0003	0.000026	0.093585
H ₂ O	0.0014	0	0.478036

V.3.1.2 Simulation avec la fonction « Shortcut-column »

Pour la simulation de la troisième colonne, il faut déterminer : le taux de reflux, le nombre d'étage théorique et le plateau d'alimentation.

La détermination du taux de reflux se fait par l'opération « shortcut column ».

La fonction « Shortcut column » est utilisée pour séparer les mélanges de solvants à plusieurs composants. Il utilise un algorithme simplifié FUG (Fenske-Underwood-Gilliland) avec l'équation de Kirckbride pour une détermination optimale du plateau d'alimentation. L'équipement offre un premier aperçu du processus de séparation mais les résultats doivent être acceptés avec prudence, en particulier pour les systèmes très imparfaits.

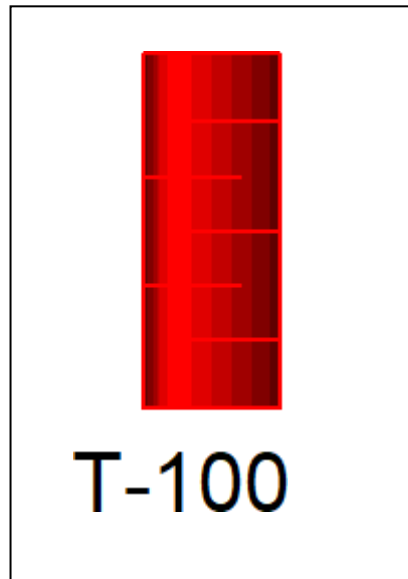


Figure V-2 : Fonction ShortCut Column.

V.3.1.2.1 Définition de la liste des constituants et du modèle thermodynamique

On sélectionne les composants suivants : méthanol, éthanol et eau dans la liste déroulante « component lists » de la nouvelle colonne.

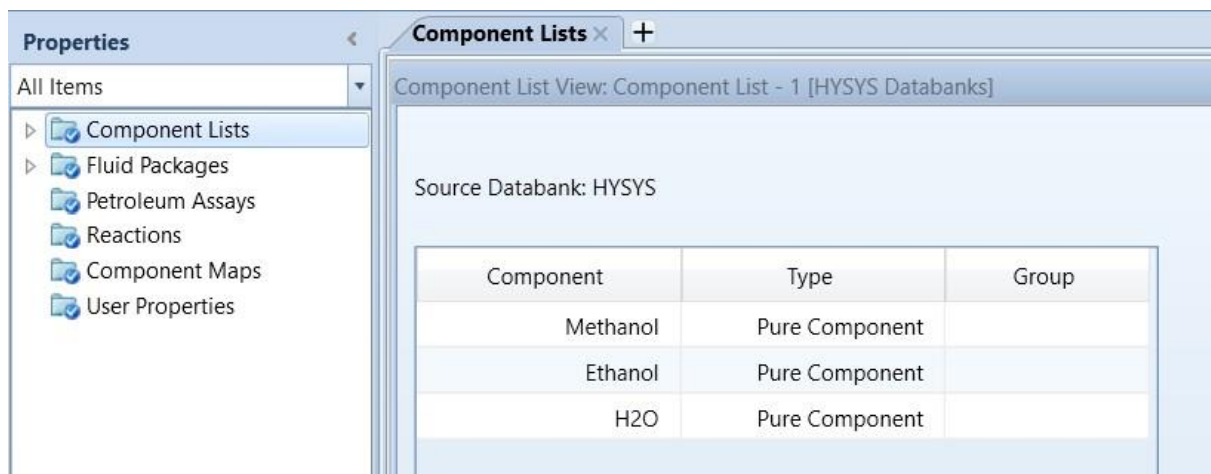


Figure V-3 : Définition de la liste des constituants.

Ensuite, on ajoute le modèle thermodynamique approprié qui permet de prédire (prévoir) le comportement et les propriétés des mélanges. Pour notre cas, on opte pour le modèle « UNIQUAC ».

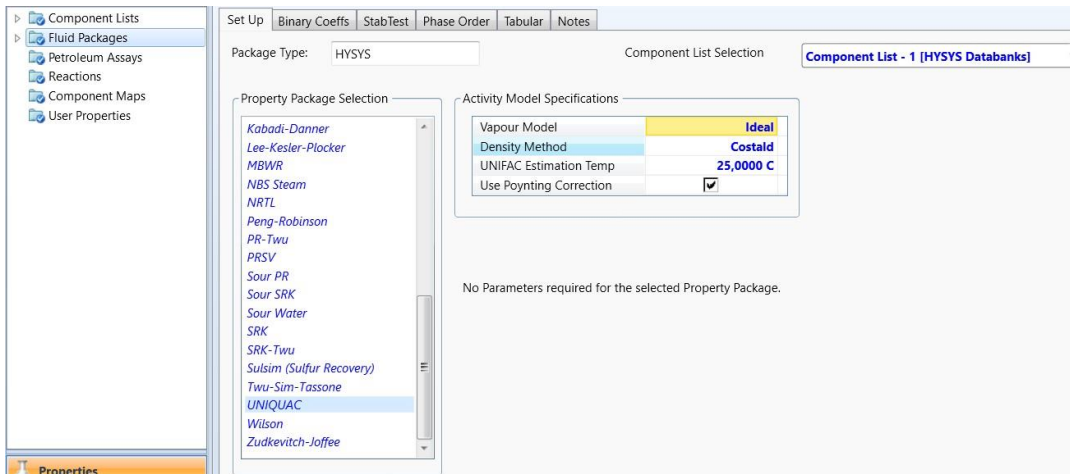


Figure V-4 : Définition du Modèle thermodynamique « Fluid package ».

V.3.1.2.2 Définition des différents débits

Pour la simulation de la colonne, il faut d'abord introduire un débit d'alimentation. Ce dernier, noté « MeOH raffiné », n'est autre que le méthanol raffiné sortant en haut de la deuxième colonne de distillation V602 avec un débit de 14000 kg/h.

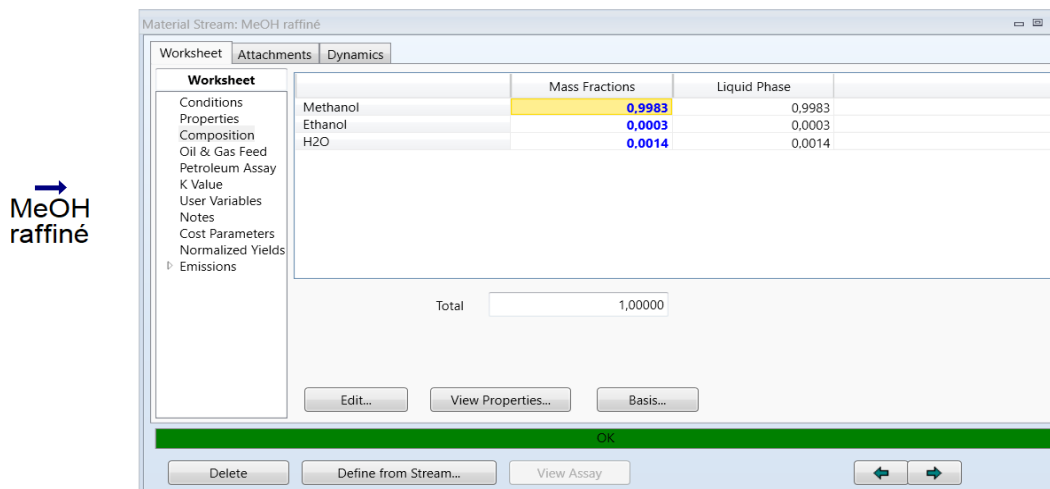


Figure V-5 : Définition de la composition du débit d'alimentation.

On doit aussi définir les propriétés de ce débit de matière, en l'occurrence, la température, la pression et le débit massique.

The screenshot shows a software window titled 'Material Stream: MeOH raffiné'. It contains a table with the following data:

Worksheet	Stream Name	MeOH raffiné	Liquid Phase
Conditions	Vapour / Phase Fraction	0,0000	1,0000
Properties	Temperature [C]	75,37	75,37
Composition	Pressure [kPa]	153,0	153,0
Oil & Gas Feed	Molar Flow [kgmole/h]	437,4	437,4
Petroleum Assay	Mass Flow [kg/h]	1,400e+004	1,400e+004
K Value	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	17,59	17,59
User Variables	Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-2,336e+005	-2,336e+005
Notes	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	86,23	86,23
Cost Parameters	Heat Flow [kJ/h]	-1,022e+008	-1,022e+008
Normalized Yields	Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h]	17,57	17,57
Emissions	Fluid Package	Basis-1	
	Utility Type		

Figure V-6 : Conditions de température, pression et débit du V-603

Après la définition de tous les paramètres du débit d'alimentation, on lance l'opération unitaire notée « Shortcut column ».

Cette opération nécessite la définition de deux autres débits de matière : le distillat « MeOH IMPCA » et le soutirât « Résidu ». En plus des débits de matière, on doit aussi définir deux débits d'énergie nécessaires pour la condensation du produit de tête de colonne et pour le chauffage du produit de pied de colonne.

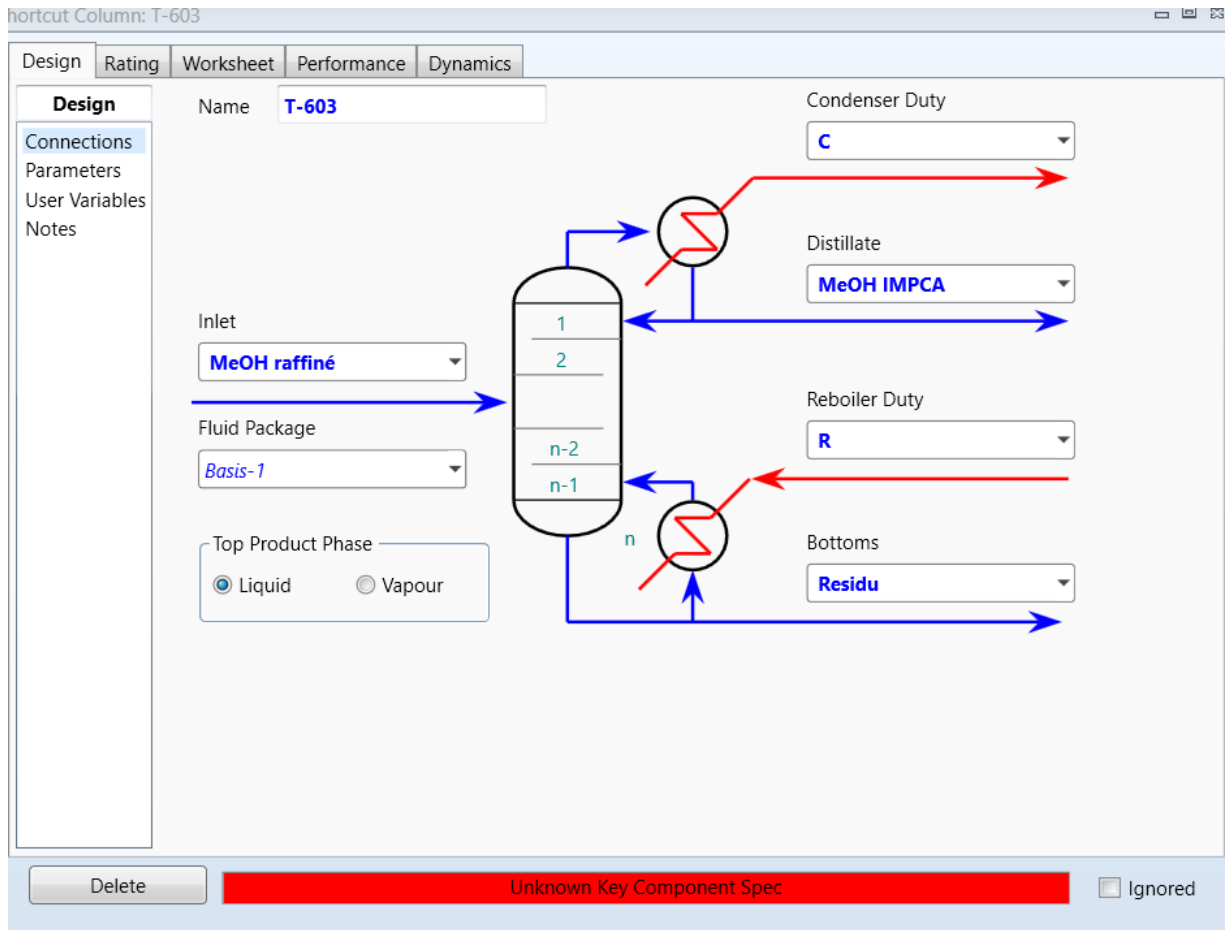


Figure V-7 : Connexions des différents débits.

D'autres paramètres doivent être renseignés :

- Choix du composé léger en bas de colonne et sa composition (méthanol) d'après la norme IMPCA.
- Choix du composé lourd en tête de colonne et sa composition (éthanol) d'après la norme IMPCA.
- Choix des pressions du condenseur et du rebouilleur.

Le taux de reflux minimale « minimum reflux ratio » est calculé par le simulateur après avoir saisi les trois paramètres ci-dessus.

Le choix du taux de reflux externe « external reflux ratio » doit être aussi saisi.

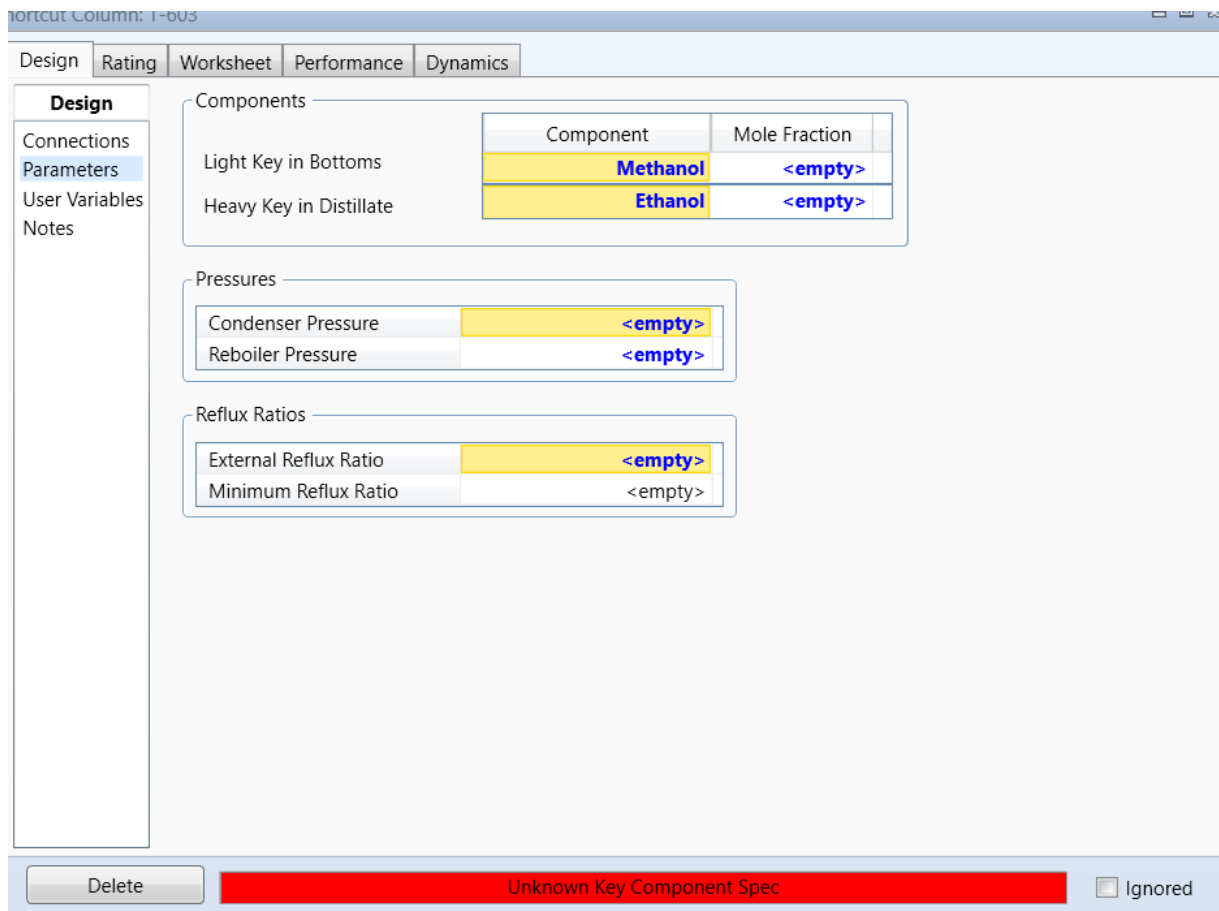


Figure V-8 : Paramètres demandés par V-603.

Une fois avoir renseigné toutes les informations demandées par le simulateur, on obtient la valeur du taux de reflux minimal calculé par le simulateur.

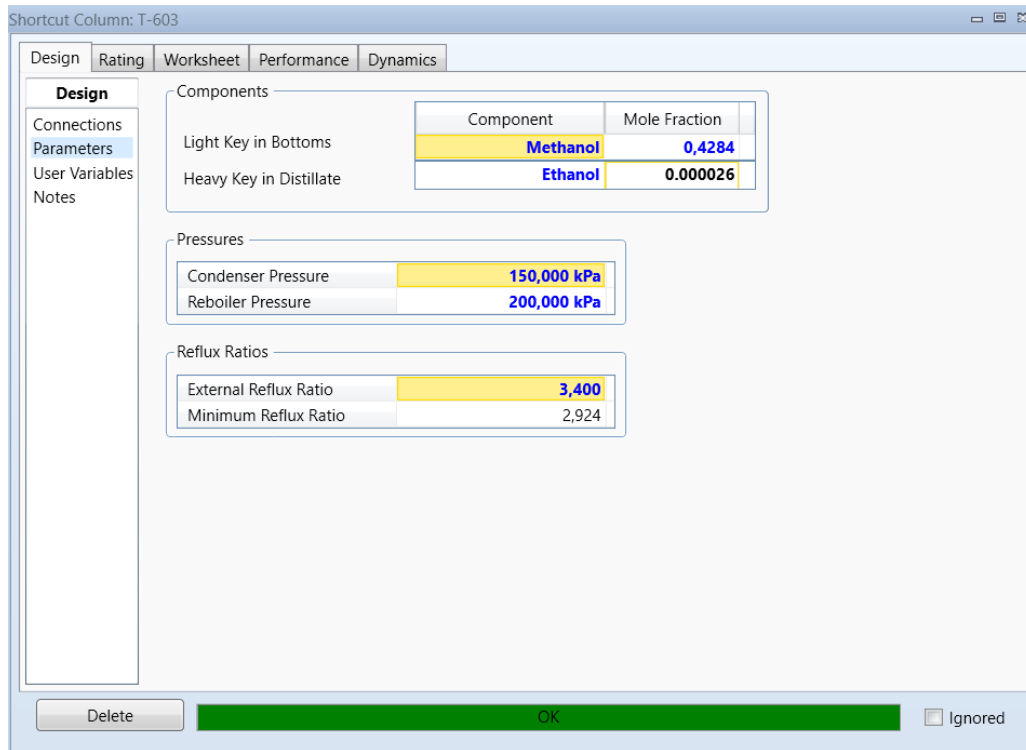


Figure V-9 : Paramètres nécessaires pour le fonctionnement du V-603.

Dans la rubrique « performance », on trouve les résultats de calcul :

- Trays : nombre de plateaux minimal, nombre de plateaux actuel et le plateau d'alimentation optimale.
- Temperatures : température du condenseur et du rebouilleur.
- Flows : contient l'ensemble des débits molaires de vapeur et de liquide et les puissances du condenseur et du rebouilleur.

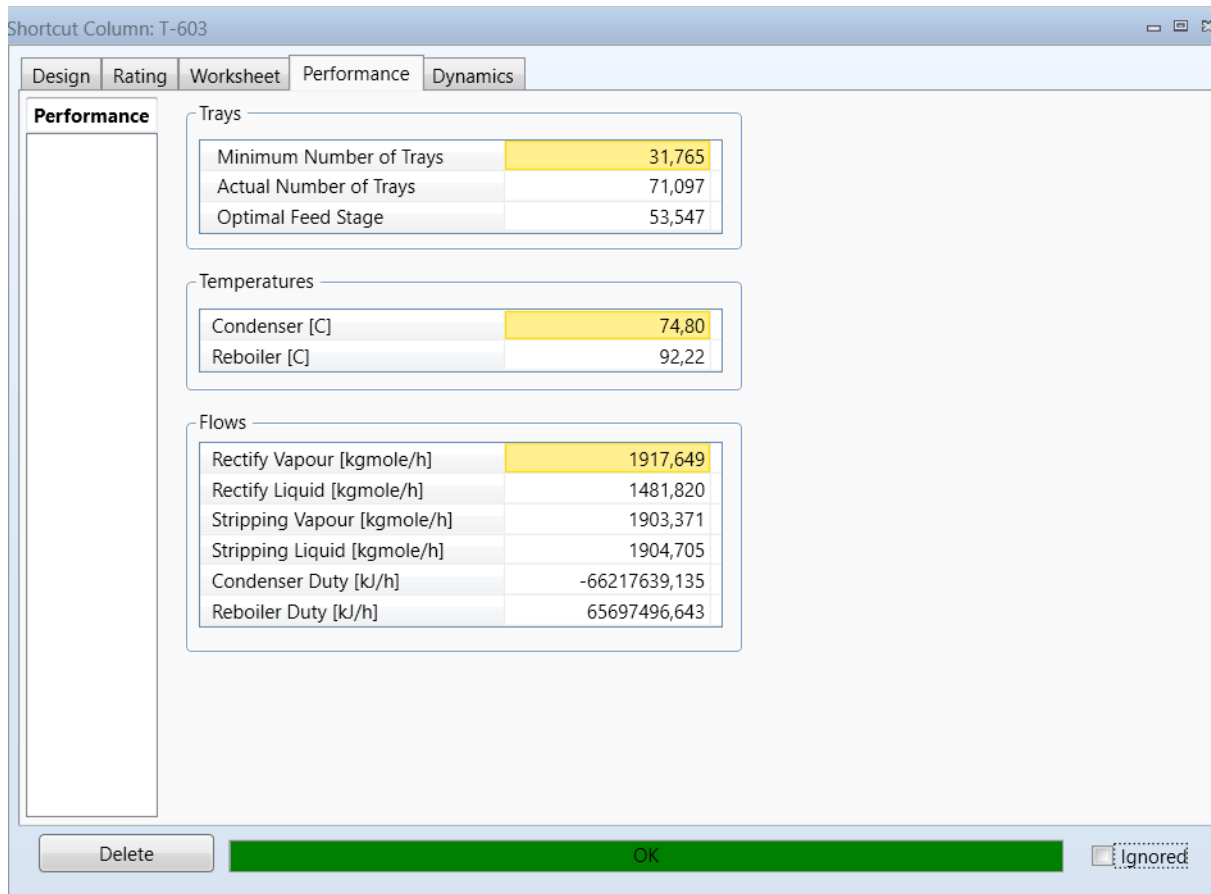


Figure V-10 : Résultats obtenu par Shortcut column.

L'opération « Shortcut column » est utilisée juste pour savoir si la séparation désirée est réellement réalisable. Cette fonction permet aussi d'avoir des informations telles que : le taux de reflux minimal, le débit du distillat, les températures du condenseur et du rebouilleur qui sont nécessaires pour réaliser une simulation plus exacte de la troisième colonne. Pour cela, on procède comme suit :

Durant la première étape, on fixe le taux de reflux à **3.4** et on varie les autres paramètres tel que le nombre d'étage et le plateau d'alimentation et on observe la variation des compositions molaires.

Tableau V-9 : Variation du nombre d'étage en fonction des compositions du distillat.

N° d'expérience	Nombre d'étage	Plateau d'alimentation	Composition du distillat
1	71	53	$x_{Ethanol}^D = 0.000021$
			$x_{MeOH}^D = 0.999979$
2	68	50	$x_{Ethanol}^D = 0.000023$
			$x_{MeOH}^D = 0.999977$
3	60	44	$x_{Ethanol}^D = 0.000026$
			$x_{MeOH}^D = 0.999973$
4	55	41	$x_{Ethanol}^D = 0.000029$
			$x_{MeOH}^D = 0.999971$
5	40	31	$x_{Ethanol}^D = 0.000041$
			$x_{MeOH}^D = 0.999957$
6	35	26	$x_{Ethanol}^D = 0.000048$
			$x_{MeOH}^D = 0.999948$

Dans la deuxième étape, on fixe le nombre de plateaux (60 plateaux) avec son plateau d'alimentation et on varie le taux de reflux et on observe le changement des compositions.

Tableau V-10 : Variation du taux de reflux en fonction des compositions du distillat.

N° d'expérience	Taux de reflux	Composition du distillat
1	3.3	$x_{Ethanol}^D = 0.000027$
		$x_{MeOH}^D = 0.999973$
2	3	$x_{Ethanol}^D = 0.000034$
		$x_{MeOH}^D = 0.999966$
3	2.7	$x_{Ethanol}^D = 0.000044$
		$x_{MeOH}^D = 0.999956$
4	2.6	$x_{Ethanol}^D = 0.000048$
		$x_{MeOH}^D = 0.999952$

D'après les résultats des deux tableaux ci-dessus on a choisi un nombre d'étage (60 étages) et un taux de reflux optimaux ($R_f = 3$).

Après avoir complété la simulation de la troisième colonne de distillation qui sert pour l'élimination d'éthanol, on la connecte avec la deuxième colonne de distillation d'objectif d'élimination d'eau

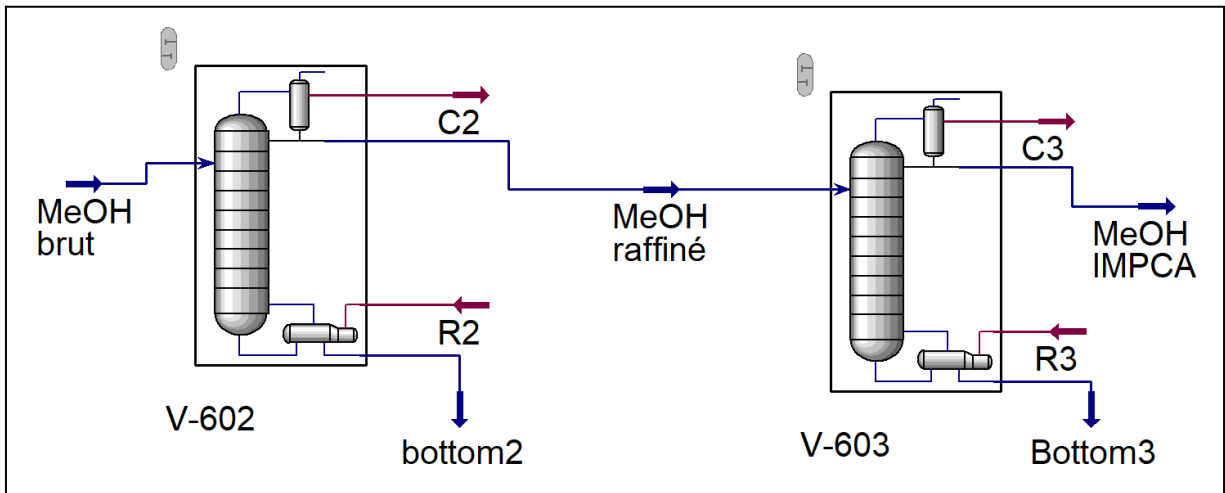


Figure V-11 : Simulation finale du V-602 et V-603.

L'option « Workbook » : est le moyen le plus rapide pour afficher les informations du procédé sous forme de tableau et il est également configuré pour la construction de la simulation.

En plus de la possibilité d'afficher les données du procédé, des modifications peuvent être apportées directement aux spécifications à partir du classeur et les calculs seront actualisés automatiquement.

Material Streams					
	Compositions	Energy Streams	Unit Ops		
Name	MeOH brut	MeOH raffiné	bottom2	MeOH IMPCA	Bottom3
Vapour Fraction	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Temperature [C]	82,00	75,36	119,4	74,80	93,61
Pressure [kPa]	400,0	153,0	195,0	150,0	200,0
Molar Flow [kgmole/h]	562,8	375,6	187,2	374,5	1,063
Mass Flow [kg/h]	1,540e+004	1,203e+004	3373	1,200e+004	27,14
Liquid Volume Flow [m3/h]	18,49	15,11	3,380	15,08	3,143e-002
Heat Flow [kJ/h]	-1,399e+008	-8,772e+007	-5,200e+007	-8,746e+007	-2,774e+005

Figure V-12 : Conditions thermodynamiques et débits de chaque Stream.

Material Streams Compositions Energy Streams Unit Ops					
Name	MeOH brut	MeOH raffiné	bottom2	MeOH IMPCA	Bottom3
Comp Mole Frac (Methanol)	0,666114	0,998177	0,000000	0,999974	0,365175
Comp Mole Frac (Ethanol)	0,000178	0,000267	0,000000	0,000026	0,085320
Comp Mole Frac (H2O)	0,333707	0,001556	1,000000	0,000000	0,549505

Figure V-13 : Compositions molaires de chaque Stream.

On constate que les résultats obtenus sont conformes à la spécification IMPCA.

Conclusion générale et recommandations

Ce projet a été effectué durant une période pratique au sein du complexe pétrochimie CP1Z situé à ARZEW.

Ce travail consiste à faire une étude et de prévoir une installation d'une nouvelle colonne de distillation dans la section 600 du complexe CP1Z dans le but d'obtenir du méthanol de grade A à un grade plus amélioré IMPCA.

La colonne de distillation V-603 est destinée à réduire la fraction d'éthanol au-dessous de 50 ppm pour une pureté élevée.

Cette étude a été réalisé à l'aide du simulateur Aspen HYSYS en introduisant les données et les paramètres nécessaires (composition, modèle thermodynamique, etc.) et de vérifier, par la suite, la qualité du produit final obtenu par cette simulation pour voir s'il est conforme à la qualité exigée par l'IMPCA.

Techniquement, cette séparation est possible. Toutefois, une investigation plus profonde doit être menée pour étudier les effets de certains paramètres tels que les conditions de température et de pression et aussi les concentrations du mélange. Une étude technico-économique s'impose pour déterminer la rentabilité d'un tel investissement. Tous ces questionnements constituent des axes de recherches sur lesquels il est intéressant de se pencher et qui peuvent faire l'objet de futurs projets de fin d'études.

Bibliographie

- [1] <https://www.methanol.org/methanol-price-supply-demand/> (Date de consultation : 20/05/2024)
- [2] <https://www.grandviewresearch.com/industry-analysis/methanol-market> (Date de consultation : 20/05/2024)
- [3] Service Formation, *Manuel Opérateur*, ENIP complexe de CP1/Z.
- [4] Benmekki. F. (2022). Polycopie : Simulateurs de procédés. Université de Mostaganem.
- [5] Wuithier, P.. (1972). *Raffinage et génie chimique Tome 2 (2^{ème} Edition)*. Paris : L'institut français du pétrole.
- [6] Walas, S. M. (2001). *Chemical Process Equipment : Selection and Design*. Washington: Butterworth-Heinemann.
- [7] Geankoplis, Christi J.. (1993). *Transport processes and unit operations (Third Edition)*. Singapura: Prentice Hall.
- [8] Wuithier, P.. (1972). *Raffinage et génie chimique Tome 1 (2^{ème} Edition)*. Paris : L'institut français du pétrole.