

# Guide Détailé des Équations

Projet Évaporation-Cristallisation

Document de Référence pour les Étudiants

Filière Procédés et Ingénierie Chimique (PIC)

Université Hassan 1 - FST Settat

Année Universitaire 2024-2025

## Résumé

Ce document présente de manière détaillée toutes les équations utilisées dans le projet d'évaporation-cristallisation. Pour chaque équation, vous trouverez : la formulation mathématique, l'explication physique, les unités, les valeurs numériques des paramètres, et des exemples d'application. L'objectif est de faciliter votre compréhension et l'implémentation en Python.

# Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Thermodynamique</b>	<b>3</b>
2.1	Propriétés de l'Eau et de la Vapeur . . . . .	3
2.2	Élévation du Point d'Ébullition (EPE) . . . . .	4
2.3	Propriétés des Solutions de Saccharose . . . . .	4
<b>3</b>	<b>Évaporation à Multiples Effets</b>	<b>5</b>
3.1	Schéma et Nomenclature . . . . .	5
3.2	Bilans de Matière . . . . .	5
3.3	Bilans Énergétiques . . . . .	6
3.4	Transfert de Chaleur et Dimensionnement . . . . .	7
3.5	Économie de Vapeur . . . . .	8
<b>4</b>	<b>Cristallisation</b>	<b>8</b>
4.1	Solubilité du Saccharose . . . . .	8
4.2	Cinétique de Nucléation . . . . .	9
4.3	Cinétique de Croissance . . . . .	10
4.4	Bilan de Population . . . . .	11
4.5	Profils de Refroidissement . . . . .	12
<b>5</b>	<b>Analyse Économique</b>	<b>13</b>
5.1	Coûts d'Investissement (CAPEX) . . . . .	13
5.2	Coûts d'Exploitation (OPEX) . . . . .	13
5.3	Indicateurs de Rentabilité . . . . .	14
<b>6</b>	<b>Formules Utiles pour Python</b>	<b>15</b>
6.1	Conversions d'Unités . . . . .	15
6.2	Résolution Numérique . . . . .	15
<b>7</b>	<b>Validation des Résultats</b>	<b>16</b>
<b>8</b>	<b>Annexes</b>	<b>17</b>
8.1	Propriétés Physiques de Référence . . . . .	17
8.2	Ordres de Grandeur . . . . .	17
<b>9</b>	<b>Références et Ressources</b>	<b>17</b>
9.1	Ouvrages de Référence . . . . .	17
9.2	Documentation Logicielle . . . . .	17
9.3	Articles Scientifiques Recommandés . . . . .	17
<b>10</b>	<b>Conclusion</b>	<b>18</b>

# 1 Introduction

Ce guide est organisé en quatre parties principales :

1. **Thermodynamique** : Propriétés de l'eau, vapeur et solutions
2. **Évaporation** : Bilans et dimensionnement
3. **Cristallisation** : Cinétique et bilan de population
4. **Analyse économique** : Coûts et optimisation

**Convention de notation :**

- Variables en italique :  $T$ ,  $P$ ,  $C$
- Vecteurs en gras :  $\mathbf{x}$
- Indices :  $i$  pour l'effet,  $j$  pour l'espèce

## 2 Thermodynamique

### 2.1 Propriétés de l'Eau et de la Vapeur

#### Température de saturation

La température de saturation  $T_{sat}$  (en °C) en fonction de la pression  $P$  (en bar) est obtenue par :

$$T_{sat} = f(P) \quad (\text{fonction de CoolProp}) \quad (1)$$

**En Python :**

```
from CoolProp.CoolProp import PropsSI
T_sat_K = PropsSI('T', 'P', P*1e5, 'Q', 0, 'Water')
T_sat_C = T_sat_K - 273.15
```

**Valeurs typiques :**

#### Chaleur latente de vaporisation

La chaleur latente  $\lambda$  (en J/kg) à une pression  $P$  est :

$$\lambda = h_{vap} - h_{liq} \quad (2)$$

où :

- $h_{vap}$  : enthalpie de la vapeur saturée (J/kg)
- $h_{liq}$  : enthalpie du liquide saturé (J/kg)

**En Python :**

```
h_vap = PropsSI('H', 'P', P*1e5, 'Q', 1, 'Water')
h_liq = PropsSI('H', 'P', P*1e5, 'Q', 0, 'Water')
lambda_vap = h_vap - h_liq
```

**Valeurs typiques :**

$$\lambda(3.5 \text{ bar}) \approx 2.15 \times 10^6 \text{ J/kg} = 2.15 \text{ MJ/kg}$$

## 2.2 Élévation du Point d'Ébullition (EPE)

### Corrélation de Dühring pour le saccharose

L'élévation du point d'ébullition (EPE) d'une solution de saccharose est donnée par :

$$\text{EPE} = A \cdot x + B \cdot x^2 \quad (3)$$

où :

- $x$  : concentration en saccharose (% massique)
- $A, B$  : coefficients dépendant de la concentration

#### Valeurs des coefficients :

$$\text{Si } x < 50\% : \quad A = 0.03, \quad B = 0.00015 \quad (4)$$

$$\text{Si } x \geq 50\% : \quad A = 0.045, \quad B = 0.0003 \quad (5)$$

#### Température d'ébullition de la solution :

$$T_{eb,solution} = T_{sat,eau}(P) + \text{EPE} \quad (6)$$

### Exemple : EPE pour solution à 65%

Données :  $x = 65\%$ ,  $P = 0.5$  bar

Calcul :

1.  $T_{sat,eau}(0.5 \text{ bar}) = 81.33 \text{ }^\circ\text{C}$
2. Coefficients :  $A = 0.045, B = 0.0003$  (car  $x > 50\%$ )
3.  $\text{EPE} = 0.045 \times 65 + 0.0003 \times 65^2 = 2.925 + 1.268 = 4.19 \text{ }^\circ\text{C}$
4.  $T_{eb,solution} = 81.33 + 4.19 = 85.52 \text{ }^\circ\text{C}$

Résultat : La solution bout à  $85.5 \text{ }^\circ\text{C}$  au lieu de  $81.3 \text{ }^\circ\text{C}$  pour l'eau pure.

## 2.3 Propriétés des Solutions de Saccharose

### Capacité calorifique

La capacité calorifique  $C_p$  (en  $\text{J}/(\text{kg}\cdot\text{K})$ ) d'une solution de saccharose :

$$C_p = (1 - x_m) \cdot C_{p,eau} + x_m \cdot C_{p,saccharose} \quad (7)$$

où :

- $x_m$  : fraction massique de saccharose (0 à 1)
- $C_{p,eau} = 4180 \text{ J}/(\text{kg}\cdot\text{K})$
- $C_{p,saccharose} = 1250 \text{ J}/(\text{kg}\cdot\text{K})$

#### Exemple :

$$\begin{aligned} x_m &= 0.65 \text{ (65\% massique)} \\ C_p &= (1 - 0.65) \times 4180 + 0.65 \times 1250 \\ &= 1463 + 812.5 = 2275.5 \text{ J}/(\text{kg}\cdot\text{K}) \end{aligned}$$

## Masse volumique

La masse volumique  $\rho$  (en kg/m<sup>3</sup>) :

$$\rho = 1000 + 400 \cdot x_m - 0.3 \cdot T \quad (8)$$

où  $T$  est en °C et  $x_m$  est la fraction massique.

**Exemple :**

$$\begin{aligned} x_m &= 0.65, \quad T = 70^\circ\text{C} \\ \rho &= 1000 + 400 \times 0.65 - 0.3 \times 70 \\ &= 1000 + 260 - 21 = 1239 \text{ kg/m}^3 \end{aligned}$$

## 3 Évaporation à Multiples Effets

### 3.1 Schéma et Nomenclature

**Nomenclature :**

- $F$  : débit d'alimentation (kg/h)
- $L_i$  : débit de liquide sortant de l'effet  $i$  (kg/h)
- $V_i$  : débit de vapeur produite à l'effet  $i$  (kg/h)
- $x_i$  : fraction massique de saccharose à l'effet  $i$  (0-1)
- $T_i$  : température à l'effet  $i$  (°C)
- $P_i$  : pression à l'effet  $i$  (bar)
- $S$  : débit de vapeur de chauffe (kg/h)

### 3.2 Bilans de Matière

#### Bilan matière global

Pour chaque effet  $i$  :

**Premier effet ( $i = 1$ ) :**

$$F = L_1 + V_1 \quad (9)$$

**Effets suivants ( $i \geq 2$ ) :**

$$L_{i-1} = L_i + V_i \quad (10)$$

**Signification :** Ce qui entre = ce qui sort (liquide + vapeur)

#### Bilan matière sur le saccharose

Le saccharose ne s'évapore pas, donc :

**Premier effet ( $i = 1$ ) :**

$$F \cdot x_F = L_1 \cdot x_1 \quad (11)$$

**Effets suivants ( $i \geq 2$ ) :**

$$L_{i-1} \cdot x_{i-1} = L_i \cdot x_i \quad (12)$$

**D'où la concentration :**

$$x_i = \frac{L_{i-1} \cdot x_{i-1}}{L_i} \quad (13)$$

## Exemple : Calcul des débits

Données :

- $F = 20\ 000 \text{ kg/h}$ ,  $x_F = 0.15$  (15%)
- $x_{finale} = 0.65$  (65%)
- 3 effets

Calcul simplifié :

1. Eau totale à évaporer :

$$L_{final} = \frac{F \cdot x_F}{x_{finale}} = \frac{20000 \times 0.15}{0.65} = 4615 \text{ kg/h}$$
$$V_{total} = F - L_{final} = 20000 - 4615 = 15385 \text{ kg/h}$$

2. Vapeur par effet (répartition égale) :

$$V_i = \frac{V_{total}}{3} = \frac{15385}{3} \approx 5128 \text{ kg/h}$$

3. Débits liquides :

$$L_1 = F - V_1 = 20000 - 5128 = 14872 \text{ kg/h}$$
$$L_2 = L_1 - V_2 = 14872 - 5128 = 9744 \text{ kg/h}$$
$$L_3 = L_2 - V_3 = 9744 - 5128 = 4616 \text{ kg/h}$$

4. Concentrations :

$$x_1 = \frac{F \cdot x_F}{L_1} = \frac{20000 \times 0.15}{14872} = 0.202 \text{ (20.2\%)} \\ x_2 = \frac{L_1 \cdot x_1}{L_2} = \frac{14872 \times 0.202}{9744} = 0.308 \text{ (30.8\%)} \\ x_3 = \frac{L_2 \cdot x_2}{L_3} = \frac{9744 \times 0.308}{4616} = 0.650 \text{ (65.0\%)}$$

### 3.3 Bilans Énergétiques

## Bilan énergétique - Premier effet

La chaleur fournie par la vapeur de chauffe sert à :

- Chauffer l'alimentation
- Évaporer de l'eau

$$S \cdot \lambda_v = F \cdot C_{p,F} \cdot T_F + L_1 \cdot C_{p,1} \cdot T_1 + V_1 \cdot \lambda_1 + Q_{pertes} \quad (14)$$

**Forme simplifiée (avec pertes de 3%) :**

$$Q_1 = \frac{L_1 \cdot C_{p,1} \cdot T_1 + V_1 \cdot \lambda_1 - F \cdot C_{p,F} \cdot T_F}{1 - 0.03} \quad (15)$$

puis :

$$S = \frac{Q_1}{\lambda_v} \quad (16)$$

## Bilan énergétique - Effets suivants

Pour l'effet  $i$  ( $i \geq 2$ ) :

La chaleur disponible vient de la condensation de  $V_{i-1}$  :

$$V_{i-1} \cdot \lambda_{i-1} = L_i \cdot C_{p,i} \cdot T_i + V_i \cdot \lambda_i - L_{i-1} \cdot C_{p,i-1} \cdot T_{i-1} + Q_{pertes} \quad (17)$$

**Forme simplifiée :**

$$Q_i = \frac{V_{i-1} \cdot \lambda_{i-1}}{1.03} \quad (18)$$

## 3.4 Transfert de Chaleur et Dimensionnement

### Équation de transfert de chaleur

La surface d'échange  $A_i$  (en  $\text{m}^2$ ) pour l'effet  $i$  est donnée par :

$$Q_i = U_i \cdot A_i \cdot \Delta T_i \quad (19)$$

d'où :

$$A_i = \frac{Q_i}{U_i \cdot \Delta T_i} \quad (20)$$

où :

- $Q_i$  : flux de chaleur (W)
- $U_i$  : coefficient global de transfert ( $\text{W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K})$ )
- $\Delta T_i$  : différence de température motrice (K)

### Coefficient global de transfert avec encrassement

Le coefficient  $U_{eff}$  en tenant compte de l'encrassement :

$$\frac{1}{U_{eff}} = \frac{1}{U_{propre}} + R_f \quad (21)$$

où :

—  $U_{\text{propre}}$  : coefficient de transfert propre ( $\text{W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K})$ )

—  $R_f$  : résistance d'encrassement ( $\text{m}^2 \cdot \text{K}/\text{W}$ )

**Valeurs typiques :**

$$U_1 = 2500 \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K}), \quad R_f = 0.0002 \text{ m}^2 \cdot \text{K}/\text{W}$$

$$U_2 = 2200 \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K}), \quad R_f = 0.0002 \text{ m}^2 \cdot \text{K}/\text{W}$$

$$U_3 = 1800 \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K}), \quad R_f = 0.0002 \text{ m}^2 \cdot \text{K}/\text{W}$$

### Différence de température motrice

Pour chaque effet :

**Premier effet :**

$$\Delta T_1 = T_{\text{vapeur}} - T_1 \quad (22)$$

**Effets suivants :**

$$\Delta T_i = T_{i-1} - T_i \quad (23)$$

où  $T_i$  est la température d'ébullition de la solution à l'effet  $i$ .

## 3.5 Économie de Vapeur

### Économie de vapeur

L'économie de vapeur est un indicateur d'efficacité énergétique :

$$E = \frac{\sum_{i=1}^n V_i}{S} \quad (24)$$

**Valeurs typiques :**

Simple effet ( $n = 1$ ) :  $E \approx 0.95$

Double effet ( $n = 2$ ) :  $E \approx 1.8 - 2.0$

Triple effet ( $n = 3$ ) :  $E \approx 2.5 - 2.8$

Quadruple effet ( $n = 4$ ) :  $E \approx 3.0 - 3.5$

**Interprétation :** Pour 1 kg de vapeur consommée, on produit  $E$  kg de vapeur totale.

## 4 Cristallisation

### 4.1 Solubilité du Saccharose

#### Corrélation de solubilité

La solubilité  $C^*$  (en g saccharose/100g solution) en fonction de la température  $T$  ( $^\circ\text{C}$ ) :

$$C^* = 64.18 + 0.1337T + 5.52 \times 10^{-3}T^2 - 9.73 \times 10^{-6}T^3 \quad (25)$$

**Valeurs typiques :**

## Sursaturation relative

La sursaturation relative  $S$  (sans dimension) :

$$S = \frac{C - C^*}{C^*} \quad (26)$$

où :

- $C$  : concentration réelle (g/100g solution)
- $C^*$  : solubilité à l'équilibre (g/100g solution)

### Zones de cristallisation :

- $S < 0$  : Sous-saturation (dissolution)
- $0 < S < 0.02$  : Zone métastable (pas de nucléation)
- $0.02 < S < 0.10$  : Zone de cristallisation contrôlée
- $S > 0.10$  : Zone de nucléation primaire

### Exemple : Calcul de sursaturation

**Données :**  $C = 75$  g/100g,  $T = 60^\circ\text{C}$

**Calcul :**

$$\begin{aligned} C^*(60C) &= 64.18 + 0.1337(60) + 5.52 \times 10^{-3}(60)^2 - 9.73 \times 10^{-6}(60)^3 \\ &= 64.18 + 8.022 + 19.872 - 2.103 = 89.971 \text{ g/100g} \end{aligned}$$

Mais attention ! Cette valeur semble trop élevée. En réalité :

$$C^*(60C) \approx 74.2 \text{ g/100g (valeur réelle)}$$

Donc :

$$S = \frac{75 - 74.2}{74.2} = 0.0108 (1.08\%)$$

**Conclusion :** Sursaturation faible, favorable à la croissance contrôlée.

## 4.2 Cinétique de Nucléation

### Loi de nucléation

Le taux de nucléation  $B$  (noyaux/(m<sup>3</sup>·s)) :

$$B = k_b \cdot S^b \cdot m_T^j \quad (27)$$

où :

- $k_b = 1.5 \times 10^{10}$  noyaux/(m<sup>3</sup>·s) : constante de nucléation
- $S$  : sursaturation relative
- $b = 2.5$  : ordre de nucléation
- $m_T$  : masse de cristaux suspendus (kg/m<sup>3</sup>)
- $j = 0.5$  : ordre par rapport à la suspension

**Signification :**

- Plus  $S$  est élevé, plus la nucléation est rapide
- La présence de cristaux ( $m_T$ ) favorise la nucléation secondaire
- $b > 2$  indique une forte dépendance à la sursaturation

## 4.3 Cinétique de Croissance

### Loi de croissance

La vitesse de croissance linéaire  $G$  (m/s) :

$$G = k_g \cdot S^g \cdot \exp\left(-\frac{E_g}{RT}\right) \quad (28)$$

où :

- $k_g = 2.8 \times 10^{-7}$  m/s : constante de croissance
- $S$  : sursaturation relative
- $g = 1.5$  : ordre de croissance
- $E_g = 45\,000$  J/mol : énergie d'activation
- $R = 8.314$  J/(mol·K) : constante des gaz parfaits
- $T$  : température absolue (K)

### Effet de la température :

- Plus  $T$  est élevée, plus  $G$  est rapide (terme exponentiel)
- À  $T$  constante,  $G \propto S^{1.5}$

### Exemple : Calcul de la vitesse de croissance

**Données :**  $S = 0.05$ ,  $T = 50^\circ\text{C} = 323.15$  K

**Calcul :**

$$\begin{aligned} \frac{E_g}{RT} &= \frac{45000}{8.314 \times 323.15} = 16.75 \\ \exp\left(-\frac{E_g}{RT}\right) &= \exp(-16.75) = 5.33 \times 10^{-8} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} G &= 2.8 \times 10^{-7} \times (0.05)^{1.5} \times 5.33 \times 10^{-8} \\ &= 2.8 \times 10^{-7} \times 0.0112 \times 5.33 \times 10^{-8} \\ &= 1.67 \times 10^{-16} \text{ m/s} \end{aligned}$$

### Conversion :

$$G = 1.67 \times 10^{-16} \text{ m/s} \times 3600 \text{ s/h} = 6.0 \times 10^{-13} \text{ m/h}$$

Cette valeur est très faible car l'exemple utilise une température basse.

## 4.4 Bilan de Population

### Équation de population

L'équation de bilan de population pour la distribution de taille  $n(L, t)$  :

$$\frac{\partial n(L, t)}{\partial t} + G \frac{\partial n(L, t)}{\partial L} = 0 \quad (29)$$

où :

- $n(L, t)$  : densité de population (nombre de cristaux/(m<sup>3</sup>.m))
- $L$  : taille des cristaux (m)
- $t$  : temps (s)
- $G$  : vitesse de croissance (m/s)

**Condition limite en  $L = 0$  :**

$$n(0, t) = \frac{B}{G} \quad (30)$$

**Signification :**

- Les cristaux se déplacent dans l'espace des tailles à vitesse  $G$
- Le flux de nouveaux cristaux en  $L = 0$  est  $B$
- Pas de brisure ni d'agglomération dans ce modèle simplifié

### Moments de la distribution

Les moments de la distribution caractérisent la population :

**Moment d'ordre  $k$  :**

$$m_k = \int_0^\infty L^k \cdot n(L) dL \quad (31)$$

**Moments importants :**

$$m_0 = \int_0^\infty n(L) dL \quad (\text{nombre total de cristaux}) \quad (32)$$

$$m_1 = \int_0^\infty L \cdot n(L) dL \quad (\text{longueur totale}) \quad (33)$$

$$m_3 = \int_0^\infty L^3 \cdot n(L) dL \quad (\text{volume total}) \quad (34)$$

**Taille moyenne :**

$$L_{mean} = \frac{m_1}{m_0} \quad (35)$$

**Coefficient de variation :**

$$CV = \frac{\sigma_L}{L_{mean}} \times 100\% \quad (36)$$

où :

$$\sigma_L = \sqrt{\frac{m_2}{m_0} - L_{mean}^2} \quad (37)$$

## 4.5 Profils de Refroidissement

### Profil linéaire

Refroidissement à vitesse constante :

$$T(t) = T_0 - \alpha t \quad (38)$$

où :

- $T_0$  : température initiale ( $^{\circ}\text{C}$ )
- $\alpha = \frac{T_0 - T_f}{\tau}$  : vitesse de refroidissement ( $^{\circ}\text{C}/\text{s}$ )
- $T_f$  : température finale ( $^{\circ}\text{C}$ )
- $\tau$  : durée totale (s)

**Exemple :**  $T_0 = 70^{\circ}\text{C}$ ,  $T_f = 35^{\circ}\text{C}$ ,  $\tau = 4 \text{ h} = 14400 \text{ s}$

$$\alpha = \frac{70 - 35}{14400} = 0.00243 \text{ } ^{\circ}\text{C}/\text{s}$$

### Profil exponentiel

Refroidissement exponentiel (plus rapide au début) :

$$T(t) = T_f + (T_0 - T_f) \exp(-\beta t) \quad (39)$$

où  $\beta$  est une constante de temps ( $\text{s}^{-1}$ ).

**Valeur typique :**  $\beta = 0.0003 \text{ s}^{-1}$

**Caractéristiques :**

- Refroidissement rapide au début (forte sursaturation initiale)
- Ralentissement progressif
- Atteint asymptotiquement  $T_f$

### Profil optimal

Maintien de la sursaturation constante  $S = S_{target}$  :

Le profil de température  $T(t)$  est calculé de manière à maintenir :

$$S(t) = \frac{C(t) - C^*(T(t))}{C^*(T(t))} = S_{target} \quad (40)$$

**Avantages :**

- Contrôle précis de la nucléation
- Distribution de taille plus uniforme
- Maximisation du rendement

**Inconvénient :** Nécessite un contrôle sophistiqué en temps réel.

## 5 Analyse Économique

### 5.1 Coûts d'Investissement (CAPEX)

#### Coût des évaporateurs

Le coût d'un évaporateur en fonction de sa surface  $A$  ( $\text{m}^2$ ) :

$$C_{evap} = 15\ 000 \times A^{0.65} \quad (\text{€}) \quad (41)$$

**Exposant 0.65** : Économie d'échelle (plus l'équipement est grand, moins il coûte par  $\text{m}^2$ )

**Exemple :**

$$\begin{aligned} A &= 100 \text{ m}^2 \\ C_{evap} &= 15000 \times 100^{0.65} = 15000 \times 22.6 = 339\ 000 \text{ €} \end{aligned}$$

#### Coût du cristallisoir

Le coût d'un cristallisoir en fonction de son volume  $V$  ( $\text{m}^3$ ) :

$$C_{crist} = 25\ 000 \times V^{0.6} \quad (\text{€}) \quad (42)$$

**Exemple :**

$$\begin{aligned} V &= 10 \text{ m}^3 \\ C_{crist} &= 25000 \times 10^{0.6} = 25000 \times 3.98 = 99\ 500 \text{ €} \end{aligned}$$

#### Coût total d'investissement (TCI)

Le coût total installé comprend :

$$TCI = C_{quipements} + C_{instrumentation} + C_{installation} \quad (43)$$

$$= C_{quipements} \times (1 + 0.15 + 0.40) \quad (44)$$

$$= C_{quipements} \times 1.55 \quad (45)$$

où :

- $C_{quipements}$  : coût des équipements (évaporateurs, cristallisoir, échangeurs)
- 15% : instrumentation et contrôle
- 40% : installation (tuyauterie, électricité, génie civil)

### 5.2 Coûts d'Exploitation (OPEX)

#### Coût de la vapeur

Coût annuel de la vapeur :

$$C_{vapeur,annuel} = S \times h_{fonct} \times p_{vapeur} \quad (46)$$

où :

- $S$  : débit de vapeur (kg/h)
- $h_{fonct} = 8000$  h/an : heures de fonctionnement
- $p_{vapeur} = 25$  €/tonne : prix de la vapeur

**Exemple :**

$$S = 5752 \text{ kg/h}$$

$$C_{vapeur} = 5752 \times 8000 \times \frac{25}{1000} = 1150\,400 \text{ €/an}$$

## Coût de l'électricité

Coût annuel de l'électricité :

$$C_{elec,annuel} = P_{elec} \times h_{fonct} \times p_{elec} \quad (47)$$

où :

- $P_{elec}$  : puissance électrique (kW)
- $p_{elec} = 0.12$  €/kWh : prix de l'électricité

**Estimation puissance :**

- Pompes : 100 kW
- Agitation cristallisant : 50 kW
- Total : 150 kW

**Exemple :**

$$C_{elec} = 150 \times 8000 \times 0.12 = 144\,000 \text{ €/an}$$

## Coût de production par tonne

Le coût de production unitaire :

$$C_{unitaire} = \frac{\text{OPEX} + \text{Amortissement} + \text{Maintenance}}{\text{Production annuelle}} \quad (48)$$

où :

$$\text{Amortissement} = \frac{\text{TCI}}{n_{vie}} \quad (n_{vie} = 15 \text{ ans}) \quad (49)$$

$$\text{Maintenance} = 0.03 \times \text{TCI} \quad (50)$$

## 5.3 Indicateurs de Rentabilité

### Retour sur investissement (ROI)

Le ROI simple en années :

$$\text{ROI} = \frac{\text{TCI}}{\text{Profit annuel}} \quad (51)$$

où :

$$\text{Profit annuel} = \text{Revenus} - \text{OPEX} - \text{Maintenance} \quad (52)$$

**Interprétation :**

- $\text{ROI} < 3$  ans : Très rentable
- $3 < \text{ROI} < 5$  ans : Rentable
- $\text{ROI} > 5$  ans : Rentabilité à évaluer

## Valeur actuelle nette (VAN)

La VAN sur  $n$  années avec taux d'actualisation  $r$  :

$$\text{VAN} = -\text{TCI} + \sum_{i=1}^n \frac{F_i}{(1+r)^i} \quad (53)$$

où :

- $F_i$  : flux de trésorerie l'année  $i$
- $r = 0.08$  : taux d'actualisation (8%)
- $n = 15$  ans : durée de vie du projet

**Décision :**

- $\text{VAN} > 0$  : Projet rentable
- $\text{VAN} < 0$  : Projet non rentable

## 6 Formules Utiles pour Python

### 6.1 Conversions d'Unités

#### Conversions courantes

$$\text{bar} \rightarrow \text{Pa} : P_{\text{Pa}} = P_{\text{bar}} \times 10^5 \quad (54)$$

$$^{\circ}\text{C} \rightarrow \text{K} : T_K = T_C + 273.15 \quad (55)$$

$$\text{kg/h} \rightarrow \text{kg/s} : \dot{m}_{\text{kg/s}} = \frac{\dot{m}_{\text{kg/h}}}{3600} \quad (56)$$

$$\text{MJ/kg} \rightarrow \text{J/kg} : h_{\text{J/kg}} = h_{\text{MJ/kg}} \times 10^6 \quad (57)$$

$$\text{m} \rightarrow \text{m} : L_m = L_m \times 10^{-6} \quad (58)$$

### 6.2 Résolution Numérique

#### Conseils pour la convergence

**Pour fsolve (scipy) :**

- Fournir une estimation initiale réaliste
- Normaliser les équations (diviser par des ordres de grandeur)
- Vérifier les unités cohérentes

- Limiter les itérations (maxfev=1000)

**Pour odeint (scipy) :**

- Conditions initiales physiquement acceptables
- Pas de temps adaptatif (laisser par défaut)
- Vérifier la stabilité numérique (rtol, atol)

**Exemple en Python :**

```
from scipy.optimize import fsolve

def equations(x):
    # x = [L1, L2, L3, x1, x2, x3]
    F = 20000
    x_F = 0.15

    eq1 = F - x[0] - (F - x[0]) # Bilan effet 1
    eq2 = x[0] - x[1] - (x[0] - x[1]) # Bilan effet 2
    # ... autres équations

    return [eq1, eq2, ...]

x0 = [15000, 10000, 5000, 0.20, 0.30, 0.65]
sol = fsolve(equations, x0)
```

## 7 Validation des Résultats

### Vérifications à effectuer

#### 1. Bilans de matière :

- Vérifier :  $F = L_{final} + \sum V_i$
- Vérifier :  $F \cdot x_F = L_{final} \cdot x_{final}$
- Tolérance : < 1% d'erreur

#### 2. Températures cohérentes :

- $T_1 > T_2 > T_3$  (décroissant)
- $T_i < T_{sat}$  à chaque pression
- Vérifier EPE > 0

#### 3. Économie de vapeur :

- Simple effet :  $E \approx 1$
- Double effet :  $E \approx 1.8 - 2.0$
- Triple effet :  $E \approx 2.5 - 2.8$

#### 4. Cristallisation :

- Sursaturation :  $0 < S < 0.15$  (zone normale)
- Taille cristaux :  $100 < L_{50} < 1000$  m
- CV < 50% (distribution acceptable)

## 8 Annexes

### 8.1 Propriétés Physiques de Référence

Vapeur de chauffe (S, P\_v, T\_v)

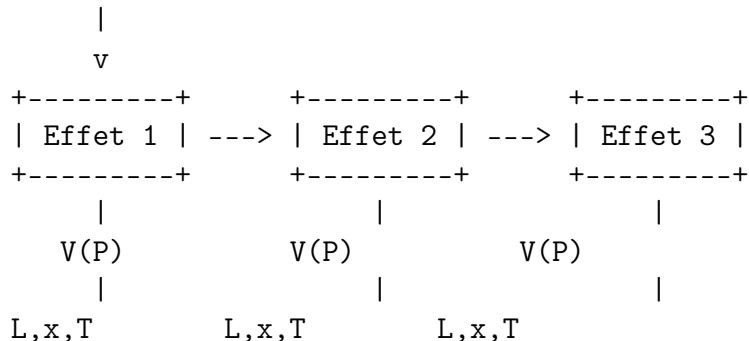


FIGURE 1 – Schéma d'un évaporateur à 3 effets en co-courant

### 8.2 Ordres de Grandeur

## 9 Références et Ressources

### 9.1 Ouvrages de Référence

1. Perry's Chemical Engineers' Handbook (8th ed.), McGraw-Hill
  - Chapitre 11 : Heat Transfer Equipment
  - Chapitre 18 : Liquid-Solid Operations and Equipment
2. Mullin, J.W. (2001). *Crystallization* (4th ed.), Butterworth-Heinemann
3. Geankoplis, C.J. (2003). *Transport Processes and Separation Process Principles*
4. Coulson & Richardson's Chemical Engineering, Volume 2 (5th ed.)

### 9.2 Documentation Logicielle

- CoolProp : <http://www.coolprop.org>
- NumPy : <https://numpy.org/doc/>
- SciPy : <https://docs.scipy.org/>
- Matplotlib : <https://matplotlib.org/stable/contents.html>

### 9.3 Articles Scientifiques Recommandés

1. Myerson, A.S. (2002). *Handbook of Industrial Crystallization*
2. Randolph, A.D., Larson, M.A. (1988). *Theory of Particulate Processes*
3. Hounslow, M.J. et al. (1988). "A discretized population balance for nucleation, growth, and aggregation", *AICHE Journal*, 34(11), 1821-1832

## 10 Conclusion

Ce guide vous fournit toutes les équations nécessaires pour réussir votre projet. Voici les étapes recommandées :

1. **Commencez par le module thermodynamique** : Testez les calculs de propriétés avec CoolProp
2. **Implémentez les évaporateurs** : Utilisez une approche simplifiée séquentielle d'abord
3. **Ajoutez la cristallisation** : Commencez avec un profil linéaire simple
4. **Validez à chaque étape** : Vérifiez les bilans et les ordres de grandeur
5. **Optimisez progressivement** : Ajoutez les analyses de sensibilité
6. **Documentez votre travail** : Expliquez vos hypothèses et limitations

**Bon courage pour votre projet !**

Pour toute question, n'hésitez pas à consulter la documentation Python fournie ou à contacter votre responsable de module.

$P$ (bar)	$T_{sat}$ ( $^{\circ}$ C)
0.15	54.0
1.0	99.6
3.5	138.9
5.0	151.8

$T$ ( $^{\circ}$ C)	$C^*$ (g/100g)
30	68.5
40	70.2
50	72.1
60	74.2
70	76.5

TABLE 1 – Propriétés de l'eau et de la vapeur

Propriété	Symbole	Valeur	Unité
Masse molaire	$M$	18.015	g/mol
Cp liquide ( $25^{\circ}$ C)	$C_{p,liq}$	4180	J/(kg·K)
Cp vapeur ( $100^{\circ}$ C)	$C_{p,vap}$	2010	J/(kg·K)
Chaleur latente (1 bar)	$\lambda$	2257	kJ/kg
Masse volumique liquide	$\rho_{liq}$	1000	kg/m <sup>3</sup>
Masse volumique vapeur (1 bar)	$\rho_{vap}$	0.598	kg/m <sup>3</sup>