

Les algorithmes de calcul des problèmes d'équilibre liquide-vapeur

L'état d'équilibre d'un mélange est parfaitement déterminé quand on connaît :

- La température T ;
- La pression p ;
- Les compositions de la phase liquide x_i et de la phase vapeur y_i en équilibre,

Ces variables sont liées par les relations suivantes

$$\begin{cases} \gamma_1(T, p, x) \times x_1 \times p_1^\sigma = y_1 \times p \\ \gamma_2(T, p, x) \times x_2 \times p_2^\sigma = y_2 \times p \\ x_1 + x_2 = 1 \\ y_1 + y_2 = 1 \end{cases}$$

Le tableau ci-dessous indique les problèmes les plus usuels d'équilibre liquide-vapeur,

Données	Résultats	Algorithme
T, x_i	p, y_i	point de bulle isotherme
p, x_i	T, y_i	point de bulle isobare
T, y_i	p, x_i	point de rosée isotherme
p, y_i	T, x_i	point de rosée isobare
p, T	x_i, y_i	flash

Algorithmes de calcul des problèmes d'équilibre liquide-vapeur

Soit le système méthanol(1)- acétate de méthyle (2)

Les coefficients d'activité sont calculées en utilisant les relations suivantes :

$$\ln(\gamma_1) = A \times x_2^2$$

$$A = 2,771 - 0,00523 \times T$$

$$\ln(\gamma_2) = A \times x_1^2$$

Les pressions de vapeurs saturantes :

$$\ln(p_1^\sigma) = 16,59158 - \frac{3643,31}{T - 33,424}$$
$$\ln(p_2^\sigma) = 14,25326 - \frac{2665,54}{T - 53,424}$$

T en K et p en kPa,

Supposons la validité du modèle : $x_i \times \gamma_i \times p_i^\sigma = y_i \times p$ calculer :

- a) p et $\{y_i\}$ pour T= 318,15 K et $x_1 = 0,25$,
- b) p, $\{x_i\}$ pour T=318,15 K et $y_1 = 0,60$,
- c) T, $\{y_i\}$ pour p=101,33 kPa et $x_1 = 0,85$,
- d) T, $\{x_i\}$ pour p=101,33 kPa et $y_1 = 0,40$,



Les algorithmes de calcul des problèmes d'équilibre liquide-vapeur

a) p et $\{y_i\}$ pour $T = 318,15 \text{ K}$ et $x_1 = 0,25$,

$$\begin{cases} \gamma_1 \times x_1 \times p_1^\sigma = y_1 \times p \\ \gamma_2 \times x_2 \times p_2^\sigma = y_2 \times p \\ x_1 + x_2 = 1 \\ y_1 + y_2 = 1 \end{cases}$$

Pour $T = 318,15 \text{ K}$

$$\ln(p_1^\sigma) = 16,59158 - \frac{3643,31}{T - 33,424}$$

$$\ln(p_2^\sigma) = 14,25326 - \frac{2665,54}{T - 53,424}$$

$$A = 2,771 - 0,00523 \times T$$

$$\ln(\gamma_1) = A \times (1 - x_1)^2$$

$$\ln(\gamma_2) = A \times x_1^2$$

Pour $x_1 = 0,25$

$$p = \gamma_1 \times x_1 \times p_1^\sigma + \gamma_2 \times x_2 \times p_2^\sigma$$

$$y_1 = \frac{\gamma_1 \times x_1 \times p_1^\sigma}{p}$$



Les algorithmes de calcul des problèmes d'équilibre liquide-vapeur

b) p , $\{x_i\}$ pour $T = 318,15$ K et $y_1 = 0,60$,

$$\begin{cases} \gamma_1 \times x_1 \times p_1^\sigma = y_1 \times p \\ \gamma_2 \times x_2 \times p_2^\sigma = y_2 \times p \\ x_1 + x_2 = 1 \\ y_1 + y_2 = 1 \end{cases}$$

$$x_1 = \frac{y_1 \times p}{\gamma_1 \times p_1^\sigma}$$

$$x_2 = \frac{y_2 \times p}{\gamma_2 \times p_2^\sigma}$$

$$x_1 + x_2 = 1 \quad \longrightarrow \quad 1 = \frac{y_1 \times p}{\gamma_1 \times p_1^\sigma} + \frac{y_2 \times p}{\gamma_2 \times p_2^\sigma}$$

$$p = \frac{1}{\frac{y_1}{\gamma_1 \times p_1^\sigma} + \frac{y_2}{\gamma_2 \times p_2^\sigma}}$$

$$\ln(p_i^\sigma) = A_i - \frac{B_i}{C_i + T_i}$$

Lecture de T et $\{y_i\}$

Initialiser $\gamma_i = 1$

1- Évaluer $\{p_i^\sigma\}$

2- Calculer : $p = \frac{1}{\frac{y_1}{\gamma_1 \times p_1^\sigma} + \frac{y_2}{\gamma_2 \times p_2^\sigma}}$

3- Calculer $\{x_i\}$: $x_i = \frac{y_i \times p}{\gamma_i \times p_i^\sigma}$

4- Évaluer $\{\gamma_i\}$

5- Calculer : $p = \frac{1}{\frac{y_1}{\gamma_1 \times p_1^\sigma} + \frac{y_2}{\gamma_2 \times p_2^\sigma}}$

6- Calculer $\{x_i\}$: $x_i = \frac{y_i \times p}{\gamma_i \times p_i^\sigma}$

7- Normalisation des $\{x_i\}$

8- Évaluer $\{\gamma_i\}$

9- Calculer : $p = \frac{1}{\frac{y_1}{\gamma_1 \times p_1^\sigma} + \frac{y_2}{\gamma_2 \times p_2^\sigma}}$

10-Tester $\delta p < \varepsilon$ oui \rightarrow affichage de p , $\{x_i\}$

Non \rightarrow aller à 6-



Les algorithmes de calcul des problèmes d'équilibre liquide-vapeur

c) T, $\{y_i\}$ pour $p = 101,33 \text{ kPa}$ et $x_1 = 0,85$,

$$\begin{cases} \gamma_1 \times x_1 \times p_1^\sigma = y_1 \times p \\ \gamma_2 \times x_2 \times p_2^\sigma = y_2 \times p \\ x_1 + x_2 = 1 \\ y_1 + y_2 = 1 \end{cases}$$

$$\gamma_1 \times x_1 \times p_1^\sigma + \gamma_2 \times x_2 \times p_2^\sigma = p$$

$$\frac{\gamma_1 \times x_1 \times p_1^\sigma + \gamma_2 \times x_2 \times p_2^\sigma}{p_1^\sigma} = \frac{p}{p_1^\sigma}$$

$$p_1^\sigma = \frac{p}{\gamma_1 \times x_1 + \gamma_2 \times x_2 \times \left(\frac{p_2^\sigma}{p_1^\sigma} \right)}$$

$$\ln(p_i^\sigma) = A_i - \frac{B_i}{C_i + T_i}$$

1-Lecture de p et $\{x_i\}$

2-Calculer $\left\{ T_i^{sb} = \frac{B_i}{A_i - \ln(p)} - C_i \right\}$

3-Calculer $T = \sum_i x_i \times T_i^{sb}$

4-Évaluer $\{p_i^\sigma\}$ et $\{\gamma_i\}$

5-Calculer $p_1^\sigma = \frac{p}{\sum_i x_i \times \gamma_i \times \left(\frac{p_i^\sigma}{p_1^\sigma} \right)}$

6-Calculer $T = \frac{B_1}{A_1 - \ln(p_1^\sigma)} - C_1$

7-Évaluer $\{p_i^\sigma\}$

8-Calculer $\left\{ y_i = \frac{x_i \times \gamma_i \times p_i^\sigma}{p} \right\}$

9-Évaluer $\{\gamma_i\}$

10-Calculer $p_1^\sigma = \frac{p}{\sum_i x_i \times \gamma_i \times \left(\frac{p_i^\sigma}{p_1^\sigma} \right)}$

11-Calculer $T = \frac{B_1}{A_1 - \ln(p_1^\sigma)} - C_1$

Tester $\delta T < \varepsilon$ oui \rightarrow affichage de T, $\{y_i\}$

Non \rightarrow aller à 7-



Les algorithmes de calcul des problèmes d'équilibre liquide-vapeur

d) T, $\{x_i\}$ pour $p = 101,33 \text{ kPa}$ et $y_1 = 0,40$,

$$\begin{cases} \gamma_1 \times x_1 \times p_1^\sigma = y_1 \times p \\ \gamma_2 \times x_2 \times p_2^\sigma = y_2 \times p \\ x_1 + x_2 = 1 \\ y_1 + y_2 = 1 \end{cases} \quad \longrightarrow \quad \begin{aligned} x_1 &= \frac{y_1 \times p}{\gamma_1 \times p_1^\sigma} \\ x_2 &= \frac{y_2 \times p}{\gamma_2 \times p_2^\sigma} \end{aligned}$$

$$x_1 + x_2 = 1 \quad \longrightarrow \quad 1 = \frac{y_1 \times p}{\gamma_1 \times p_1^\sigma} + \frac{y_2 \times p}{\gamma_2 \times p_2^\sigma}$$

$$p = \frac{p_1^\sigma}{p_1^\sigma \times \left(\frac{y_1}{\gamma_1 \times p_1^\sigma} + \frac{y_2}{\gamma_2 \times p_2^\sigma} \right)}$$

$$p = \frac{p_1^\sigma}{\left(\frac{y_1}{\gamma_1} + \frac{y_2}{\gamma_2} \times \left(\frac{p_1^\sigma}{p_2^\sigma} \right) \right)}$$

$$p_1^\sigma = p \times \left(\frac{y_1}{\gamma_1} + \frac{y_2}{\gamma_2} \times \left(\frac{p_1^\sigma}{p_2^\sigma} \right) \right)$$

$$\ln(p_i^\sigma) = A_i - \frac{B_i}{C_i + T_i}$$

