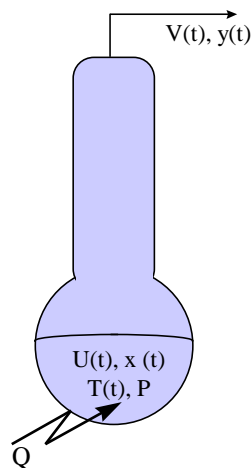


## MODELISATION D'UNE UNITE DE SEPARATION MONOETAGEE « BATCH »

### « DISTILLATION DE RAYLEIGH »



$t$  : temps  
 $V$  : débit total vapeur  
 $y$  : composition vapeur  
 $U$  : rétention liquide  
 $x$  : composition liquide  
 $T$  : température  
 $Q$  : puissance de chauffe

*Toutes ces grandeurs sont supposées connues à  $t=0$*

Etablir le modèle permettant de décrire le fonctionnement à pression et à puissance de chauffe fixées d'une unité de séparation mono-étagée batch.

Ecrire un programme FORTRAN **général** et **structuré** permettant la simulation de l'opération unitaire proposée.

Le modèle sera résolu par appel au solveur DISCO (méthode de Gear) mis à disposition sur le réseau de l'école (bibliothèque libdisco.lib) : les arguments d'appel sont décrits en ANNEXE. Le Jacobien du système et la matrice de masse seront traités comme des matrices denses et calculés numériquement.

## I - Appliquez votre programme à l'exemple suivant :

*pression de fonctionnement* : 1. atm

*constituants* : CHLOROFORME       $\text{CHCl}_3$   
METHANOL                       $\text{CH}_4\text{O}$   
ACETONE                         $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}$

*Instant initial* :

Température : température d'ébullition (à calculer, dans un premier temps, en utilisant ProSim Plus®)

Charge : 1 kmol

Composition molaire : 0.2 0.3 0.5 (à faire varier ; Cf. partie II)

Puissance au bouilleur :  $4.10^4$  W

Vous utiliserez le modèle thermodynamique NRTL (Modèle de coefficients d'activité). Les paramètres d'interaction binaire seront pris dans la banque standard de ProSim Plus®.

### Données complémentaires

		Chloroforme	Méthanol	Acétone
$T_{\text{eb}}$ à 1 atm	[K]	334.33	337.85	329.44
$H_{\text{vap}}$ à $T_{\text{eb}}$ , 1 atm	[J/kmol]	2.95 E+07	3.53 E+07	2.96 E+07
$C_p^{\text{vap}}$	[J/kmol/K]	6.89 E+04	4.64 E+04	8.05 E+04
$C_p^{\text{liq}}$	[J/kmol/K]	1.17 E+05	8.91 E+04	1.34 E+05
$P^{\text{sat}}$	[Pa]			
	A	146.43	81.768	69.006
	B	-7792.3	-6876	-5599.6
	C	-20.614	-8.7078	-7.0985
	D	0.024578	7.1926 E-06	6.2237 E-06
	E	1	2	2

avec  $P^{\text{sat}}(T) = \exp\left[A + \frac{B}{T} + C \cdot \ln(T) + D \cdot T^E\right]$ . Dans cette expression, T est exprimée en Kelvin.

## II – Etude de la distillation du ternaire Chloroforme - Méthanol - Acétone.

Le diagramme triangulaire joint donne les différents points singuliers du ternaire (corps purs, azéotropes binaires, azéotropes ternaires). Le programme que vous avez écrit vous permet de tracer l'évolution de la composition au bouilleur au cours du temps (dans un diagramme rectangulaire « composition fonction du temps » ou dans le diagramme triangulaire). Ces courbes sont appelées **courbes de résidus**. Etudier l'influence de la composition initiale sur les courbes de résidus. ✓

## III - Voici quelques thèmes de réflexion complémentaires :

- Etudier l'influence des paramètres physiques du modèle : Q, P ✓
- Introduire dans votre programme, le calcul automatique de la température de bulle du mélange en fonction de sa composition et de la pression (pour le calcul du point initial). ✓
- Etudier l'influence du modèle thermodynamique : prendre en compte les enthalpies de mélange (calculées par le modèle NRTL). ✓
- Etudier l'influence du modèle thermodynamique : faire le calcul en supposant la solution idéale. ✓
- Modifier votre programme de façon à décrire une première phase de chauffe monophasique (température initiale 300K) puis, ayant atteint la température d'ébullition, une seconde phase de distillation à proprement parler, diphasique. Vous devrez faire appel à la gestion d'évènement dans DISCO (sous-programme GEX). ✓
- Le solveur DISCO met en œuvre la méthode de Gear (cf. cours de modélisation). Proposer une interprétation de son fonctionnement : interpréter les appels aux procédures FX, DFDX, DFDXDOT et GEX dans le contexte de la méthode de Gear (prédicteur – correcteur). ✓

## Description des azéotropes

	chloroforme	Méthanol	Acétone	Température [K]
1	0,65	0	0,35	338,19
2	0	0,21	0,79	328,65
3	0,66	0,34	0	326,85
4	0,21	0,43	0,36	330,29

Méthanol

Chloroforme

Acétone

