

1^{ere} année master de technologie industrielle pour l'usine de future
TIUF

Projet de modélisation et simulation des procédés avec Aspen Plus



Réalisé par :

LOUKILI Smail

Encadré par :

Mr.BAKHER Zineelabidine

Année universitaire : 2023/2024



University
Mohammed VI
Polytechnic



Introduction

La modélisation et la simulation des procédés sont des outils indispensables dans l'industrie chimique pour la conception, l'analyse et l'optimisation des processus de fabrication. Aspen Plus est l'un des logiciels de simulation les plus couramment utilisés dans ce domaine, offrant une plateforme puissante pour simuler une large gamme de processus chimiques et industriels.

Ce projet vise à modéliser et simuler un procédé de production d'eau déminéralisée à partir d'eau brute en utilisant Aspen Plus. Le procédé fait appel à des équipements de base tels qu'une pompe, un échangeur de chaleur, une turbine et un mélangeur. La composition typique de l'eau brute est définie comme étant constituée de 99,5 % d'eau et 0,5 % de sels dissous (NaCl) en pourcentage massique. Les conditions opératoires sont : une température de 25°C, une pression de 1 bar et un débit massique de 1000 kg/h. Le modèle thermodynamique utilisé est le modèle Peng-Robinson.

Configuration du modèle :

Notre feed est composé de 99,5 % d'eau et 0,5 % de sels dissous (NaCl) en pourcentage massique, avec les paramètres suivants : Température = 25°C, Pression = 1 bar, Débit massique = 1000 kg/h. et on a utilisé Peng-Robinson comme modèle.

Main Flowsheet × FEEDIN (MATERIAL) × +

☒ Mixed
 ☐ CI Solid
 ☐ NC Solid
 ☐ Flash Options
 ☐ EO Options
 ☐ Costing
 ☐ Comments

Specifications

Flash Type: **Temperature** **Pressure**

State variables

Temperature: 25 C

Pressure: 1 bar

Vapor fraction:

Total flow basis: **Mass**

Total flow rate: 1000 kg/hr

Solvent:

Reference Temperature

Volume flow reference temperature: C

Component concentration reference temperature: C

Composition: **Mass-Frac**

Component	Value
SODIU-01	0.05
WATER	0.95
ACETO-01	

Total: 1

Energie nécessaire pour la pompe :

Pour augmenter la pression du flux d'eau brute de 1 bar à 5 bars, il est nécessaire de calculer l'énergie requise pour cette opération à l'aide d'une pompe. En utilisant Aspen Plus, nous pouvons simuler cette étape afin d'obtenir des résultats précis.

☒ Mixed
 ☐ CI Solid
 ☐ NC Solid
 ☐ Flash Options
 ☐ EO Options
 ☐ Costing
 ☐ Comments

Specifications

Flash Type: **Temperature** **Pressure**

State variables

Temperature: 25 C

Pressure: 1 bar

Vapor fraction:

Total flow basis: **Mass**

Total flow rate: 1000 kg/hr

Solvent:

Composition: **Mass-Frac**

Component	Value
WATER	0.995
SODIU-01	0.005

Main Flowsheet × Setup - Specifications × **POMPE (Pump)** × +

Specifications Calculation Options Flash Options Utility Comments

Model

☒ Pump ☐ Turbine

Pump outlet specification

☐ Discharge pressure N/sqm

☒ Pressure increase bar

☐ Pressure ratio

☐ Power required Watt

☐ Use performance curve to determine discharge conditions

Main Flowsheet × **POMPE (Pump) - Results** × +

Summary	Balance	Performance Curve	Utility Usage	Status
Fluid power	0.107025361	kW		
Brake power	0.361991	kW		
Electricity	0.361991	kW		
Volumetric flow rate	16.0538	l/min		
Pressure change	4	bar		
NPSH available	9.5695	m-kgf/kg		
NPSH required				
Head developed	39.2888	m-kgf/kg		
Pump efficiency used	0.295658			
Net work required	0.361991	kW		
Outlet pressure	5	bar		
Outlet temperature	25.2112	C		

Débit volumique de sortie :

Nous pouvons utiliser Aspen Plus pour calculer directement le débit volumique de sortie à partir des pressions d'entrée et de sortie. Le débit volumique de sortie de la pompe est de 16 l/min.

Main Flowsheet × OUT-POMP (MATERIAL) - Results (Default) × +					
Material	Vol. % Curves	Wt. % Curves	Petroleum	Polymers	Solids
Status					
		Units	EAU+NACL	OUT-POMP	
▶ Molar Enthalpy		cal/mol	-69266.3	-69260.5	
▶ Mass Enthalpy		cal/gm	-3711.88	-3711.57	
▶ Molar Entropy		cal/mol-K	-40.0608	-40.0483	
▶ Mass Entropy		cal/gm-K	-2.1468	-2.14613	
▶ Molar Density		mol/cc	0.0556343	0.0556253	
▶ Mass Density		gm/cc	1.03818	1.03801	
▶ Enthalpy Flow		cal/sec	-1.03108e+06	-1.03099e+06	
▶ Average MW			18.6607	18.6607	
▶ + Mole Flows		kmol/hr	53.5886	53.5886	
▶ + Mole Fractions					
▶ + Mass Flows		kg/hr	1000	1000	
▶ + Mass Fractions					
▶ Volume Flow		l/sec	0.267563	0.267607	
▶ + Liquid Phase					
<add properties>					

Chaleur nécessaire pour chauffer le flux :

Il faut déterminer la chaleur nécessaire pour chauffer le flux 25°C à 85°C

Main Flowsheet × HEATER (Heater) - Results × +		
Summary	Balance	Phase Equilibrium
Utility Usage	Status	
Outlet temperature	85	C
Outlet pressure	5	bar
Vapor fraction	0	
Heat duty	72067.9	Watt
Net duty	72067.9	Watt
1st liquid / Total liquid	1	
Pressure-drop correlation parameter		
Pressure drop	0	bar

Echangeur de chaleur à contre-courant :

Main Flowsheet × FEEDIN (MATERIAL) × ACCOLD (MATERIAL) × +

☒ Mixed CI Solid NC Solid Flash Options EO Options Costing Comments

Specifications

Flash Type **Temperature** **Pressure**

State variables

Temperature **C**

Pressure **bar**

Vapor fraction

Total flow basis **Mass**

Total flow rate **kg/hr**

Solvent

Reference Temperature

Volume flow reference temperature **C**

Component concentration reference temperature **C**

Composition

Mass-Frac

Component	Value
SODIU-01	
WATER	
ACETO-01	1

Total

Main Flowsheet × EXCHANGE (HeatX) × +

☒ Specifications Streams LMTD Pressure Drop ☒ U Methods Film Coefficients Utilities Comments

Model fidelity

☒ Shortcut ☐ Detailed ☐ Shell & Tube ☐ Kettle Reboiler ☐ Thermosyphon ☐ Air Cooled ☐ Plate

Hot fluid

☐ Shell ☒ Tube

Shortcut flow direction

☒ Countercurrent ☐ Cocurrent ☐ Multipass, calculate number of shells ☐ Multipass, shells in series

Calculation mode **Design**

Exchanger specification

Specification **Hot stream outlet temperature**

Value **C**

Exchanger area **sqm**

Constant UA **kW/K**

Minimum temperature approach **C**

Reconcile

Size Exchanger Specify Geometry Results

Calcul de la surface d'échange :

Template: <Default>

HeatX

Outlet cold stream pressure [bar]	5
Outlet cold stream vapor fraction	0
Heat duty [cal/sec]	17274
Calculated heat duty [cal/sec]	17274
Required exchanger area [sqm]	3.00246
Actual exchanger area [sqm]	3.00246
Average U (Dirty) [cal/sec-sqcm-K]	0.0203019
Average U (Clean)	
UA [cal/sec-K]	609.556
LMTD (Corrected) [C]	28.3387
LMTD correction factor	1
Thermal effectiveness	
Number of transfer units	
Number of shells in series	1

Fraction molaire :

	Units	EAU+NACL	COLD FEED	
▶ Molar Entropy	cal/mol-K	-40.0608	-40.062	
▶ Mass Entropy	cal/gm-K	-2.1468	-2.14686	
▶ Molar Density	mol/cc	0.0556343	0.0556343	
▶ Mass Density	gm/cc	1.03818	1.03818	
▶ Enthalpy Flow	cal/sec	-1.03108e+06	-1.03105e+06	
▶ Average MW		18.6607	18.6607	
▶ + Mole Flows	kmol/hr	53.5886	53.5886	
▶ - Mole Fractions				
▶ SODIU-01		0.015965	0.015965	
▶ WATER		0.984035	0.984035	
▶ ACETO-01		0	0	
▶ + Mass Flows	kg/hr	1000	1000	
▶ - Mass Fractions				
▶ SODIU-01		0.05	0.05	
▶ WATER		0.95	0.95	

Energie récupérée par la turbine :

La modélisation d'une turbine pour récupérer de l'énergie de l'eau après l'échangeur de chaleur implique la réduction de la pression de 5 bars à 1 bar. Le rendement de la turbine est de 70 %. Utilisant Aspen Plus, nous pouvons simuler cette étape pour déterminer l'énergie récupérée par la turbine et analyser les performances du système dans ces conditions.

Main Flowsheet x ECHANGEU (HeatX) - Summary x TURBINE (Pum		
Summary	Balance	Performance Curve
Fluid power	-107.025	Watt
Brake power	-74.9178	Watt
Electricity	-74.9178	Watt
Volumetric flow rate	0.267563	l/sec
Pressure change	-4	bar
NPSH available	48.8583	m-kgf/kg
NPSH required		
Head developed	-39.2888	m-kgf/kg
Pump efficiency used	0.7	
Net work required	-74.9178	Watt
Outlet pressure	1	bar
Outlet temperature	25.0267	C

Simulation de mélangeur :

Après passage dans la turbine, le fluide est mélangé avec de l'eau déminéralisée (pure) ayant un débit massique de 1000 kg/h, une température de 10°C et une pression de 2 bars. Cette étape peut également être modélisée dans Aspen Plus pour évaluer les conditions finales du mélange et optimiser le procédé.

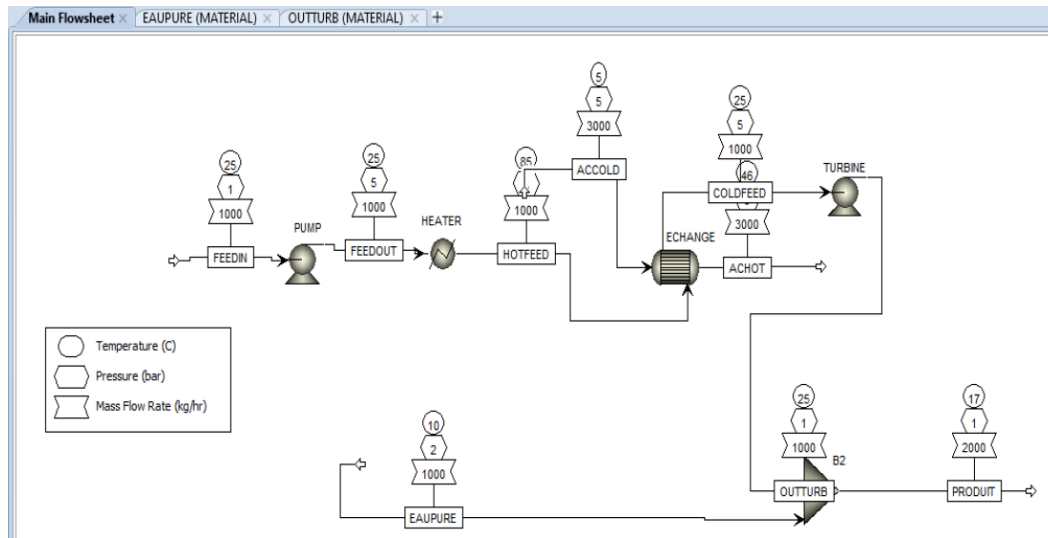
Main Flowsheet x EAUPURE (MATERIAL) x +											
<div> <input checked="" type="radio"/> Mixed <input type="radio"/> CI Solid <input type="radio"/> NC Solid <input type="radio"/> Flash Options <input type="radio"/> EO Options <input type="radio"/> Costing <input type="radio"/> Comments </div>											
<div> <div> <div>Specifications</div> <div> <div>Flash Type</div> <div> <div>Temperature</div> <div>Pressure</div> </div> </div> </div> <div> <div>State variables</div> <div> <div>Temperature</div> <div>10 C</div> </div> <div> <div>Pressure</div> <div>2 bar</div> </div> <div> <div>Vapor fraction</div> <div></div> </div> <div> <div>Total flow basis</div> <div>Mass</div> </div> <div> <div>Total flow rate</div> <div>1000 kg/hr</div> </div> <div> <div>Solvent</div> <div></div> </div> </div> </div>											
<div> <div>Reference Temperature</div> <div> <div>Volume flow reference temperature</div> <div>C</div> </div> <div> <div>Component concentration reference temperature</div> <div>C</div> </div> </div>											
<div> <div>Composition</div> <div>Mass-Frac</div> <table border="1"> <thead> <tr> <th>Component</th> <th>Value</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>SODIU-01</td> <td></td> </tr> <tr> <td>WATER</td> <td>1</td> </tr> <tr> <td>ACETO-01</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Total</td> <td>1</td> </tr> </tbody> </table> </div>		Component	Value	SODIU-01		WATER	1	ACETO-01		Total	1
Component	Value										
SODIU-01											
WATER	1										
ACETO-01											
Total	1										

Voici les proportions finales du mélange en ce qui concerne la concentration en sel, la pression et la température :

Material		Vol. % Curves	Wt. % Curves	Petroleum	Polymers	Solids	Status
		Units		S7			
▶	Molar Entropy	cal/mol-K		-40.588			
▶	Mass Entropy	cal/gm-K		-2.21401			
▶	Molar Density	mol/cc		0.0558531			
▶	Mass Density	gm/cc		1.02392			
▶	Enthalpy Flow	cal/sec		-2.09525e+06			
▶	Average MW			18.3323			
▶	+ Mole Flows	kmol/hr		109.097			
▶	+ Mole Fractions						
▶	+ Mass Flows	kg/hr		2000			
▶	- Mass Fractions						
▶	SODIU-01			0.025			
▶	WATER			0.975			
▶	ACETO-01			0			
▶	Volume Flow	l/min		32.5547			
▶	+ Liquid Phase						
▶	<add properties>						

TURBINE (Pump) x		Main Flowsheet x		S-1 x		ECHANGE (HeatX) - Summary x		S7 (MATERIAL) - Results						
Material		Vol.% Curves		Wt. % Curves		Petroleum		Polymers		Solids		Status		
						Units		S7						
	Stream Class							CONVEN						
	Maximum Relative Error													
	Cost Flow					\$/hr								
	- MIXED Substream													
	Phase							Liquid Phase						
	Temperature					C		17.3713						
	Pressure					bar		1						
	Molar Vapor Fraction							0						
	Molar Liquid Fraction							1						
	Molar Solid Fraction							0						
	Mass Vapor Fraction							0						
	Mass Liquid Fraction							1						
	Mass Solid Fraction							0						
	Molar Enthalpy					cal/mol		-69139.6						
	Mass Enthalpy					cal/gm		-3771.46						
	Molar Entropy					cal/mol-K		-40.588						

Flowsheet de procédée :



Analyse de sensibilité :

Est nécessaire pour déterminer l'impact de la température de l'échangeur de chaleur sur la consommation d'énergie global

Software interface for sensitivity analysis, showing the 'Define' tab.

Manipulated variables (drag and drop variables from form to the grid below)

Variable	Active	Manipulated variable	Units
1	<input checked="" type="checkbox"/>	Block-Var Block=HEATER Variable=TEMP Sentence=...	C

Buttons: New, Delete, Copy, Paste

Edit selected variable

Manipulated variable:

- Variable: 1
- Type: Block-Var
- Block: HEATER
- Variable: TEMP
- Sentence: PARAM
- Units: C

Manipulated variable limits:

- ☒ Equidistant ☐ Logarithmic ☐ List of values
- Start point: 0 C
- End point: 100 C
- ☒ Number of points: 15
- ☐ Increment: 7.142857 C

☒ Report labels

Main Flowsheet × EAUPURE (MATERIAL) × OUTTURB (MATERIAL) × S-1 × S-1 - Results Summary - Plot × S

☑ Vary ☑ Define ☑ Tabulate Options Cases Fortran Declarations Comments

Sampled variables (drag and drop variables from form to the grid below)

Variable	Definition
POWER	Block-Var Block=HEATER Variable=NET-DUTY Sentence=RESULTS Units=kW

New Delete Copy Paste Move Up Move Down View Variables

Edit selected variable

Variable: **POWER**

Category:

- ☐ All
- ☒ Blocks
- ☐ Streams
- ☐ Model Utility
- ☐ Property Parameters
- ☐ Reactions

Reference

Type: **Block-Var**

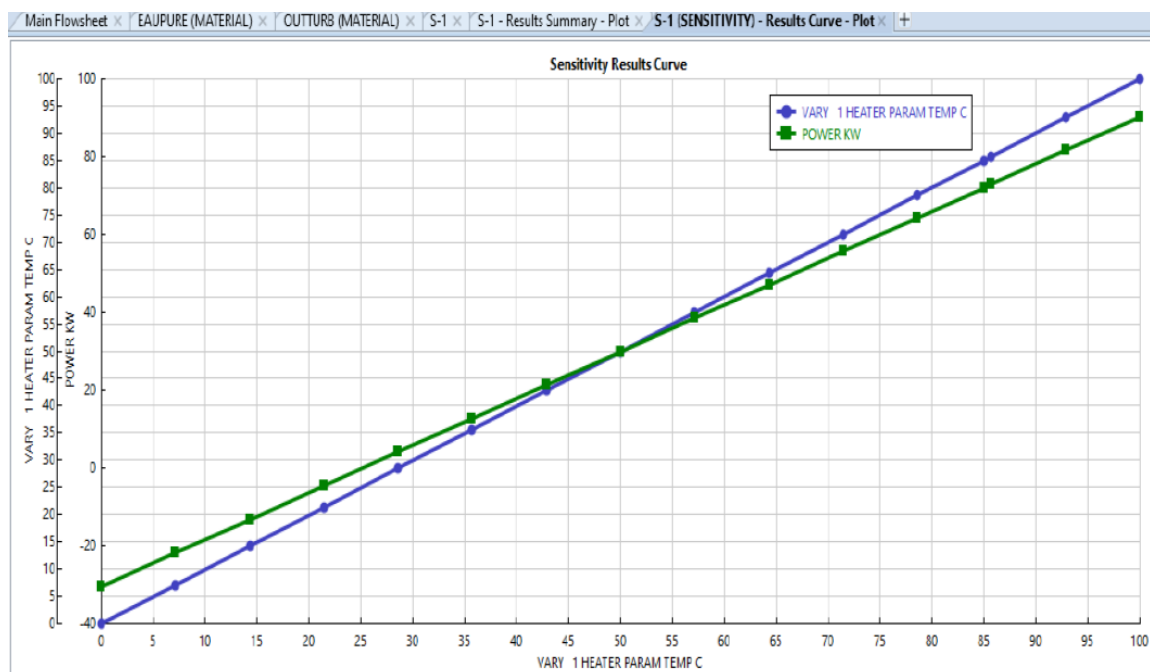
Block: **HEATER**

Variable: **NET-DUTY**

Sentence: **RESULTS**

Units: **kW**

La courbe illustrant les résultats de cette analyse :



Observations :

Si la température augmente, cela entraîne une augmentation de la consommation d'énergie globale, car chauffer un fluide à une température plus élevée nécessite davantage d'énergie.

Bilan matière global :

Main Flowsheet × PRODUCT (MATERIAL) - Results (Default) × +									
Material Vol. % Curves Wt. % Curves Petroleum Polymers Solids Status									
		Units	FEEDIN	FEEDOUT	HOTFEED	COLDFEED	HOTFEED	OUTTURB	PRODUIT
— Mole Flows		kmol/hr	53.5886	53.5886	53.5886	53.5886	53.5886	53.5886	109.097
>	SODIU-01	kmol/hr	0.855542	0.855542	0.855542	0.855542	0.855542	0.855542	0.855542
>	WATER	kmol/hr	52.733	52.733	52.733	52.733	52.733	52.733	108.241
>	ACETO-01	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0
— Mole Fractions									
>	SODIU-01		0.015965	0.015965	0.015965	0.015965	0.015965	0.015965	0.00784203
>	WATER		0.984035	0.984035	0.984035	0.984035	0.984035	0.984035	0.992158
>	ACETO-01		0	0	0	0	0	0	0
— Mass Flows		kg/hr	1000	1000	1000	1000	1000	1000	2000
>	SODIU-01	kg/hr	50	50	50	50	50	50	50
>	WATER	kg/hr	950	950	950	950	950	950	1950
>	ACETO-01	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0
— Mass Fractions									
>	SODIU-01		0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.025
>	WATER		0.95	0.95	0.95	0.95	0.95	0.95	0.975
>	ACETO-01		0	0	0	0	0	0	0
>	Volume Flow	l/min	16.0538	16.054	16.852	16.0538	16.852	16.0541	32.5547

Les débits massiques et molaires des produits finaux après le mélangeur :

Material	Vol. % Curves	Wt. % Curves	Petroleum	Polymers	Solids	Status
			Units		PRODUIT	
►	— Mole Flows		kmol/hr		109.097	
►	SODIU-01		kmol/hr		0.855542	
►	WATER		kmol/hr		108.241	
►	ACETO-01		kmol/hr		0	
►	— Mole Fractions					
►	SODIU-01				0.00784203	
►	WATER				0.992158	
►	ACETO-01				0	
►	— Mass Flows		kg/hr		2000	
►	SODIU-01		kg/hr		50	
►	WATER		kg/hr		1950	
►	ACETO-01		kg/hr		0	
►	— Mass Fractions					
►	SODIU-01				0.025	
►	WATER				0.975	
►	ACETO-01				0	
►	Volume Flow		l/min		32.5547	

Conclusion

Nous avons développé un processus complet qui inclut le pompage, le chauffage, l'échange de chaleur, la récupération d'énergie par turbine et le mélange. Chaque étape a été minutieusement modélisée et simulée pour évaluer ses performances et son efficacité.

L'analyse de sensibilité a permis d'évaluer l'impact de la température de l'échangeur de chaleur sur la consommation totale d'énergie. Cette étude a révélé une augmentation significative de la consommation d'énergie avec l'élévation de la température, identifiant ainsi des opportunités d'optimisation énergétique.

Le bilan matière global a confirmé la conservation de la masse tout au long du processus. L'addition d'eau déminéralisée au flux traité a efficacement réduit la concentration de sel, démontrant la capacité du processus à produire de l'eau de haute qualité avec une faible teneur en sels dissous.

Les simulations ont validé le bon fonctionnement de chaque équipement. La pompe a augmenté la pression du flux de 1 bar à 5 bars, l'échangeur de chaleur a réussi le transfert de chaleur entre les flux chaud et froid, et la turbine a récupéré de l'énergie en réduisant la pression du flux.