

Simulation des procédés : Généralités

1. Introduction

Le **génie des procédés** est l'application de la chimie-physique pour la transformation de la matière à l'échelle industrielle. Les techniques du génie des procédés on les retrouve dans l'industrie pharmaceutique, l'agroalimentaire ou encore la pétrochimie (*dictionnaire français sur internet*).

La **simulation des procédés** est un outil utilisé pour la conception, le développement et l'optimisation des procédés industriels dans le domaine de la chimie, l'environnement et les opérations unitaires.

Les **simulateurs** de procédés sont les outils de base ils permettent d'établir de manière efficace et rigoureuse les bilans matière et énergie.

La **modélisation** d'un procédé décrit le comportement d'un système par une équation mathématique ou une installation de laboratoire. Une des principales finalités du modèle établi, est d'être utilisée dans la simulation. Les modèles proviennent des équations fondamentales, les bilans de matières et de chaleurs et les équations d'équilibre entre phases. Toutes ces équations forment des systèmes d'équations linaires ou non linéaires algébriques ou différentielles qui seront résolues par des méthodes numériques.

La simulation des procédés inclut aussi :

- Les propriétés thermo-physiques telles que pressions de vapeur, viscosités, données calorifiques... des corps purs et des mélanges
- Les paramètres de fonctionnement des différents appareils tels que les réacteurs, les colonnes de distillation, les pompes...
- Les réactions chimiques et cinétiques...
- Les données relatives à l'environnement et à la sécurité.

2. Modélisation

Un modèle est la représentation d'un système ou d'un procédé par un ensemble d'équations ou par un montage expérimental permettant la simulation des conditions de fonctionnement est conduisant à l'établissement de lois prévisionnelles.

Il existe différents types de modèles :

➤ Modèle Mathématique

Le modèle mathématique décrit un procédé par un ensemble d'équation qui résultent des lois fondamentales ou des bilans de matières et d'énergie, traduisant les effets mécaniques, thermiques ou physico-chimiques. Ces effets sont souvent couplés à des équations se résumant parfois à des relations empiriques.

➤ Modèle analogique

Basé sur la transformation de variable, le modèle analogique donne une représentation voisine par un montage analogique au précédé. On distingue les analogies mécaniques, électriques... Ces dernières sont souvent utilisées en transfert thermique.

➤ Modèle Homologique

Le modèle homologique associé à l'expérience sur maquette, transpose l'ensemble des conditions opératoires réelles vers un domaine plus facilement accessible à l'expérimentateur. La maquette est alors un instrument qui permet de visualiser les phénomènes, de mesurer et d'acquérir des données. Cette pratique est fréquente dans les études hydrodynamiques.

➤ Modèle Aléatoire ou stochastique

Ce modèle est lié aux phénomènes aléatoires méconnus par les lois de la physique ou de la chimie. Il est établi sur la base d'un nombre important d'expériences ou d'observations. Il est utilisé dans certains domaines comme la météorologie, la psychologie ou les études de dangers.

Les étapes principales à suivre dans l'élaboration d'un modèle quelconque sont :

- 1) Description du système à analyser ;
- 2) Identification précise des échanges à travers les frontières du système ;
- 3) Description de la configuration interne du système et de ses opérations ;
- 4) Traduction mathématique du modèle en équation ;
- 5) Résolution et critiques ;
- 6) Représentation schématique du modèle.

Cette méthodologie doit identifier les variables d'entrées et de sortie ainsi que les paramètres d'action.

3. Simulation

La simulation de système ou d'un procédé consiste à calculer des variables de fonctionnement à partir de la description mathématique fournie par le modèle. Généralement le problème consiste à résoudre un système d'équations linéaires ou non linéaires.

On distingue trois types de simulation :

➤ Simulation simultanée

La simulation en simultané correspond en une connaissance parfaite d'un système à simuler par des équations de bilans et de lois physiques. A partir des équations de bilans un calcul sur le système est alors entrepris et tend vers une solution simulant son fonctionnement.

➤ Simulation séquentielle

La simulation séquentielle correspond à un traitement immédiat des entrées d'un système donné. Le calcul des variables de sortie se fait par des équations mathématiques. L'acquisition des données à l'entrée se fait suivant des observations et des prélèvements sur le système lui-même.

➤ Simulation par substitution

La simulation par substitution nécessite la mise en place d'un modèle physique ou mathématique où toutes les relations fonctionnelles sont établies. Dans ce cas les données ne sont pas forcément connues, elles peuvent être fixées a priori pour initier le calcul. Ce calcul peut être répété à partir de nouvelles valeurs jusqu'à obtenir une convergence fixée par la précision désirée.

Une méthodologie générale peut être adoptée pour simuler un procédé complexe de génie chimique. Cette stratégie comporte les étapes suivantes.

- 1) Définition du problème
- 2) Modélisation du procédé ou système
- 3) Organisation des équations (modélisation mathématique)
- 4) Calcul
- 5) Interprétations des résultats

Enfin la simulation consiste à construire un modèle d'une situation réelle puis à faire des expériences sur ce modèle.

4. Optimisation

La résolution d'un problème d'optimisation suppose au préalable la connaissance formelle d'une fonction objective appelée parfois fonction coût. L'optimum cherché est soit un maximum ou un minimum de cette fonction.

On distingue deux cas d'optimisation, une optimisation avec contraintes et une optimisation sans contraintes. Le second cas, les variables sont indépendantes mais dans le premier cas les variables sont limitées par des valeurs. On retient les contraintes d'égalités et les contraintes d'inégalité.

Référence :

1. J.P. EUZEN, P. TRANBOUZE et J.P. WAUQUIER,
Méthodologie pour l'extrapolation des procédés chimiques, Ed. Technip 1993.

2. M. FEIDT,
Thermodynamique et optimisation énergétique, Ed. Lavoisier 2004.

Pour apprendre ce cours, il faut que je réponde à ces questions.

«La plupart des enseignants perdent leur temps en posant des questions qui visent à découvrir ce qu'un élève ne sait pas, alors que le véritable art du questionnement consiste à découvrir ce que l'élève sait ou est capable de savoir.» – Albert Einstein.

1. Parmi les opérations suivantes les quelles relèvent du génie des procédés :

- La distillation
- L'absorption
- L'adsorption
- L'extraction liquide-liquide
- L'extraction solide-liquide
- L'extraction par CO₂
- Le chauffage
- Le refroidissement
- La congélation
- L'agitation
- La décantation
- Le contrôle de la température
- Le contrôle du débit
- Le contrôle de la pression
- L'expédition du gaz
- L'expédition du pétrole
- L'extraction des hydrates de gaz
- L'extraction du gaz de schiste
- La cristallisation
- La recristallisation
- La centrifugation
- La filtration
- La filtration sous vide
- La filtration sous pression

2. Donner le type des modèles suivants :

- Les équations de Navier-Stokes
- Les équations de Maxwell-Lorentz
- L'équation d'Einstein
- Les lois du mouvement de Newton
- La loi des gaz parfaits
- Equation d'état Soave-Redlich-Kwong pour les gaz réels
- Equation d'état de Peng-Robinson pour les gaz réels
- Un système d'équation algébrique
- Le logiciel HYSYS
- Le logiciel ChemCad
- Une soufflerie
- Une unité pilote de synthèse de l'aspirine
- Canal pour simuler l'écoulement de l'eau
- Bassin de simulation des vagues

- Un circuit électrique pour simuler les résistances thermiques dans un four de chauffage
- Une base de données météorologiques
- Rose des vents
- Rose de la population
- Etude épidémiologique

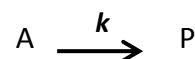
3. Exercices mathématiques :

Exercice 1 : On veut déterminer une relation ou un modèle entre deux variables x et y représentés par le tableau suivant :

x	0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6
y	0,22	0,33	0,42	0,63	0,71	0,92	0,93

- 1) Faire une régression linéaire simple
- 2) Déterminer les coefficients a et b de la droite de régression
- 3) Déterminer le coefficient de détermination de la régression
- 4) Commenter

Exercice 2 : Les données suivantes représentent la variation d'une concentration en fonction du temps d'une réaction chimique à volume constant dans un réacteur fermé.



Déterminer la fonction ou le modèle $C_A=f(t)$.

- 1) On suppose que la réaction d'ordre 0
- 2) On suppose que l'ordre de la réaction est 1
- 3) On suppose que l'ordre de la réaction est 2

On donne :

t(min)	0	5	10	20	30	40	50
C _A (mol/l)	1,00	0,81	0,65	0,52	0,31	0,29	0,28

Rappel de cours : Pour une régression linéaire simple de la forme $y = ax + b$:

$$a = \frac{n \times \sum x_i y_i - \sum x_i \times \sum y_i}{n \times \sum x_i^2 - \sum x_i \times \sum x_i}$$

$$b = \frac{\sum x_i^2 \times \sum y_i - \sum x_i \times \sum x_i y_i}{n \times \sum x_i^2 - \sum x_i \times \sum x_i}$$

$$R^2 = \frac{(n \times \sum x_i y_i - \sum x_i \times \sum y_i)^2}{(n \times \sum x_i^2 - \sum x_i \times \sum x_i) \times (n \times \sum y_i^2 - \sum y_i \times \sum y_i)}$$

$$\text{Condition : } R^2 > \frac{\sqrt{3}}{2}$$