REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POLULAIRE

MINISTERE DE L'ENEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

جامعة جيجل
مكتبة كلية العلوم والتكنولوجيا
رقم الجرد: 12064

Université de Jijel

Faculté Des Sciences et de Technologie

Département de Génie des Procédés

Mémoire de fin d'étude présenté en vue de l'obtention du diplôme MASTER

Option : Génie de l'Environnement

SIMULATION D'UNE COLONNE DE DISTILLATION SEPARANT LE MELANGE AMMONIAC-EAU

Présenté par : **RIDOUH Abd El Wadoud**

BOUCHICHA Nabila

جامعة محمد الصديق بن يحيى - جيجل
مكتبة الكلية
كلية العلوم والتكنولوجيا

Soutenance publiquement le 15 juin 2015

Devant les jurys composés de :

- Pr : BAICHA.A — Président
- Dr: DARNANE — Rapporteur
- Dr: RIDA.K — Examinateur

Promotion 2015

À mon père ;

À ma mère ;

À mon frère ;

À mes sœurs ...

À mes amis ...

À mes collègues ...

Je dédie ce mémoire

Dédicace

*Tout d'abord, je remercie **Dieu** le tout puissant de nous avoir donné la volonté et nous avoir aidé à accomplir ce travail.*

C'est avec un immense plaisir que je dédie ce modeste travail à :

*À mon très **cher père**, pour toi **maman**, pour ta bonne éducation, pour tes aides morales et encouragements.*

À mes très chères sœurs

À mes frères

Toutes mes amies

À mes collègues

À tous ceux que j'aime et m'aiment

À tous les étudiants de génie des procédés

Nabila

REMERCIEMENT

*Avant tous nous remercions le bon **Dieu** qui nous a donné le courage et la volonté d'aller jusqu'au bout et de ramener ce présent travail à son ultime point.*

*Nous adressons les plus sincères remerciements à notre directeur de thèse M^{eme}.**DERNENE.D** qui nous encadré et soutenu par ces conseilles*

et ces connaissances.

*Nous adressons les plus sincères remerciements à Monsieur **BAICHA**, Pour l'honneur de faire accepter la présidence de jurys.*

*Nous adressons également les plus sincères remerciements à Monsieur **RIDA**, qui a accepté de faire partie des jurys.*

Je remercie particulièrement :

Tout le corps des enseignants du département de génie des procédés, aussi du département de la science et technologie.

En fin, nous adressons nous remerciement à toutes personnes ayant contribuée de prés ou de lion à la réalisation de mémoire.

Merci à tous.

TABLE DES MATIÈRES

TABLE DES MATIÈRES

Dédicaces

Remerciements

Liste des figures

Abréviations utilisées

INTRODUCTION GÉNÉRALE 1

CHAPITRE I : bibliographique sur la distillation

I.1 Définition de la distillation 3

I.2 Principe de fonctionnement d'une colonne de distillation 3

I.3 Équilibre liquide- vapeur 5

I.4 Equation de bilan 5

I.4.1 Bilan sur toute la colonne 6

I.4.2 Bilan de matière par zones 6

I.4.2.1 Bilan sur la zone d'enrichissement 6

I.4.2.2 Bilan sur la zone d épuisement 7

I.5 Méthodes graphiques d'étude de la distillation 7

I.5.1 Méthode de McCabe –Theile 8

I.5.1.1 Reflux total 10

I.5.1.2 Refluxminimal 11

I.5.2 Méthode de Ponchon –Savarit 12

I.6 Irréversibilités thermodynamiques dans une colonne à distiller 14

I.7 La production d'entropie 15

CHAPITRE II : simulation d'une colonne de distillation

II.1 Introduction 16
II.2 Modélisation d'une colonne de distillation.....16
II.2.1 Calcul des équilibres liquide-vapeur 16
II.2.2 Calcul de la colonne à distiller 17
II.2.2.1 Equation MESH.....18
II.2.2.2 Méthode de la matrice tri diagonale 21
II.2.2.3 Imposition des puretés x_1 et x_n.....23
II.3 Simulation du procédé 24

CHAPITRE III: Résultats de simulation et discussions

III.1 Introduction 27
III.2 Tracés des diagrammes du mélange ammoniac-eau 27
III.2.1 Diagramme isotherme 27
III.2.2 Diagramme isobare 28
III.2.3 Diagramme Composition de la vapeur en fonction de celle du liquide ..30
III.2.4 Diagramme enthalpique.....30
III.3 résultats de simulation de la colonne à distiller.....32
III.3.1 Colonne de 7 étages.....32
III.3.2 Colonne de 9étages.....39
III.3.3 Colonne de 11 étages.....44
III.4 comparison de la production d'entropie totale dans chaque colonne.....49

CONCLUSION GÉNÉRALE 50
RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

LISTE DES FIGURES

LISTE DES FIGURE

CHAPITRE I

Figure I.1 : colonne de distillation..... 4

Figure I.2 : Zone d'enrichissement..... 6

Figure 1.3 : Zone d'épuisement..... 7

Figure I.4 : Diagramme de McCabe–Thiele..... 9

Figure I.5: Diagramme de McCabe–thiele pour un taux de reflux total..... 10

Figure I.6 : Diagramme McCabe-Thiele pour un taux de reflux minimal..... 11

Figure I.7: Construction de Ponchon –Savarit..... 13

CHAPITRE II

Figure II .1: Schéma d'une colonne de distillation..... 19

Figure II .2: organigramme du programme..... 26

CHAPITRE III

FigureIII. 1: Diagramme isotherme ammoniac –eau..... 28

Figure III.2: Diagramme isobare eau-ammoniac..... 29

Figure III.3 : Composition de la vapeur en fonction de celle du liquide ammoniac – eau..... 30

Figure III.4: Diagramme enthalpique de mélange ammoniac-eau..... 31

FigureIII.5 : Débits liquides dans chaque étage sous différente pressions..... .33

Figure III. 6 : Débits vapeurs dans chaque étage sous différente pressions..... 34

FigureIII.7 : Compositions liquides massique x_{NH3}, x_{H2O} dans chaque étagesous différente pressions..... 35

Figure III.8 : Températures dans chaque étage sous différente pressions..... 36

Figure III. 9 : Productions d'entropie dans chaque étage sous différente pressions.. 37

Figure III.10 : construction de ponchon –savarit..... 38

Figure III.11 : Débit liquide dans chaque étage sous différente pressions.....39

Figure III.12 : Débits vapeurs dans chaque étage sous différente pressions.....40

Figure III.13: Composition liquide massique x_{NH3}, x_{H2O} dans chaque étage sous différentepressions.....41

Figure III.14 : Températures dans chaque étage sous différente pressions..... 42

Figure III.15 : Production d'entropie dans chaque étage sous différente pressions.....43

Figure III. 16: Débites liquide dans chaque étage sous différente pressions..... 44

Figure III.17 : Débits vapeur dans chaque étage sous différente pressions..... 45

Figure III.18 : Compositions liquides massiques dans chaque étage dans différents pression..... 46

Figure III.19: Températures dans chaque étage sous différents pressions..... 47

Figure III.20 : production d'entropie dans chaque étage sous différente pressions 48

ABRÉVIATIONS UTILISÉES

Abréviations utilisées

A, B, C, D	Constantes
F	Débit de l'alimentation, ($kg.s^{-1}$)
D	Débit du distillat, ($kg.s^{-1}$)
R	Débit de résidu, ($kg.s^{-1}$)
V	Débit massique vapeur dans la section d'enrichissement, ($kg.s^{-1}$)
V'	Débit massique vapeur dans la section d'épuisement, ($kg.s^{-1}$)
L	Débit massique liquide dans la section d'enrichissement, ($kg.s_{-1}$)
L'	Débit massique liquide dans la section d'épuisement, ($kg.s_{-1}$)
W	Débit de soutirage vapeur, ($kg.s^{-1}$)
U	Débit de soutirage liquide, ($kg.s^{-1}$)
h	Enthalpie massique liquide dans la section d'enrichissement, ($kJ.kg^{-1}$)
h'	Enthalpie massique liquide dans la section d'épuisement, ($kJ.kg^{-1}$)
H	Enthalpie massique vapeur dans la section d'enrichissement, ($kJ.kg^{-1}$)
H'	Enthalpie massique vapeur dans la section d'épuisement, ($kJ.kg^{-1}$)

S	Entropie massique vapeur, ($kJ.kg^{-1}.K^{-1}$)
s	Entropie massique liquide, ($kJ.kg^{-1}.K^{-1}$)
r	taux de reflux
r'	taux de rebouillage
K	Constante d'équilibre liquide vapeur, (y/x)
x	Composition massique liquide
y	Composition massique vapeur
z_F	Composition alimentation
T	Température, (K)
P	Pression, (bar)
Q	Flux de Chaleur, (kW)
E	paramètre : $E = HD + \frac{QC}{D}$
E'	paramètre : $E' = HR + \frac{QB}{R}$

Lettres grecques :

σ	Production entropie, ($kW.K^{-1}$)
ε	Erreur

Indices

i	constituant
j	numéro du plateau
n	nombre d'étage
m	nombre de constituant
R	résidu
D	distillat
B	bouilleur
C	condenseur

INTRODUCTION GÉNÉRALE

Introduction générale

La distillation est un procédé fondamental de séparation en génie chimique, qui permet, en exploitant les différences de volatilité des constituants d'un mélange, la séparation ou le fractionnement de ses constituants en fonction de leur température d'ébullition. La simplicité du procédé et le prix de revient relativement acceptable font de la distillation une opération de base dans les processus d'élaboration des produits chimiques et pétroliers; c'est ainsi qu'en raffinerie, aussi bien que dans les usines pétrochimiques, les colonnes de distillation sont largement présentes, soit au stade de préparation de la charge avant le traitement, soit au stade de fractionnement et purification après le traitement.

De nos jours, et avec le développement de l'outil informatique, beaucoup de travaux de recherche se sont penchés vers l'étude et la simulation informatique de beaucoup de phénomènes physiques et chimiques faisant intervenir des équations de transfert de matière et d'équilibres entre phases assez complexes telles est le cas de la distillation.

Nous choisissons ce thème grâce à son importance soit pour le cadre de recherche fondamentale de nombreuses études ont été réalisées afin de comprendre la simulation d'une colonne distillée.

L'objectif de notre travail est l'étude de l'efficacité d'une colonne de distillation séparant le mélange binaire non idéal ammoniac-eau, la comparaison entre les paramètres internes de fonctionnement de la colonne (le débit de vapeur, le débit de liquide, la température) et la production d'entropie en fonction de la pression et du nombre d'étages, basée sur des équations d'équilibre liquide-vapeur et les bilans de matière dans les deux sections de la colonne, une analyse des irréversibilités thermodynamiques dans chaque colonne qui se traduit par une production d'entropie et étudie leur impacte énergétique sur l'environnement, ainsi que l'étude de l'influence

de la pression et le nombre d'étages sur les performances énergétiques de trois colonnes.

Ce manuscrit s'articule autour de trois chapitres :

Dans le premier chapitre nous présentons d'abord des rappels théoriques sur la distillation et principe de fonctionnent.

La séparation d'un mélange binaire est représentée graphiquement par deux méthodes de détermination de nombre de plateaux théoriques la méthode de McCabe-Thiele utilisé uniquement les bilans de matières et les données enthalpiques, la méthode de Ponchon- Savarit qui exploite les bilans de matière et d'énergie à l'équilibre appliqué sur les mélanges non idéaux.

Le deuxième chapitre est consacré au calcul de la colonne de distillation. On a développé un programme de simulation de la colonne basé sur la méthode numérique de la matrice tri diagonale qui consiste à écrire l'équation MESH sous forme matricielle pour séparer le mélange ammoniac – eau, Réalisée en langage Fortran 77 conçu pour faciliter et accélérer la résolution des problèmes complexes.

La présentation des résultats, sont présentés dans le dernier chapitre, où il été étudie les paramètres internes de fonctionnements débit liquide, débit vapeur, température, composition massique liquide d'ammoniac, eau et production d'entropie de diverse pression et nombre d'étages.

Il est ainsi possible de faire une comparaison entre différentes colonnes de 7, 9,11 étages réalisant la même séparation.

Nous terminerons ce présent travail par une conclusion générale dans laquelle nous donnerons des perspectives et de l'amélioration qui peuvent être prises en compte pour la continuité de ce présent travail.

CHAPITRE I

ETUDE BIBLIOGRAPHIQUE SUR LA DISTILLATION

I.1 Définition de la distillation

La distillation est une opération physique de séparation, elle permet de fractionner un mélange complexe en plusieurs produits en exploitant leurs différences de volatilités, de température d'ébullition et de densité.

La distillation est une opération double, après chauffage jusqu'à l'ébullition, la phase vapeur surmontant le liquide bouillant et en équilibre avec celui-ci n'a pas la même composition. Par condensation de la phase vapeur, on obtient un liquide nommé **distillat** (dit aussi produit de tête) dont la composition diffère de celle du mélange initial.

La phase liquide non évaporée constitue le **résidu** (appelée également produit de pied ou de fond).

Le distillat est enrichi en constituants légers de température d'ébullition moins élevée, tandis que le résidu est formé par les constituants lourds dont la température d'ébullition est plus élevée. La distillation s'effectue dans une colonne a distillé.

I.2 Principe de fonctionnement d'une colonne de distillation

La configuration de base d'une colonne à distiller consiste en un ensemble de plateaux théoriques de séparation dans lequel circule à contre-courant une vapeur générée par un bouilleur et un liquide généré dans le condenseur et redescendant par gravité vers le bas de la colonne [1].

Une colonne de distillation est représentée avec l'alimentation introduite en un point situé entre le distillat en tête et le résidu en bas de la colonne.

À partir de la zone d'alimentation, la vapeur s'enrichit en composé le plus volatil vers les plateaux supérieurs et le liquide s'enrichit en composé le moins volatil vers les plateaux inférieurs.

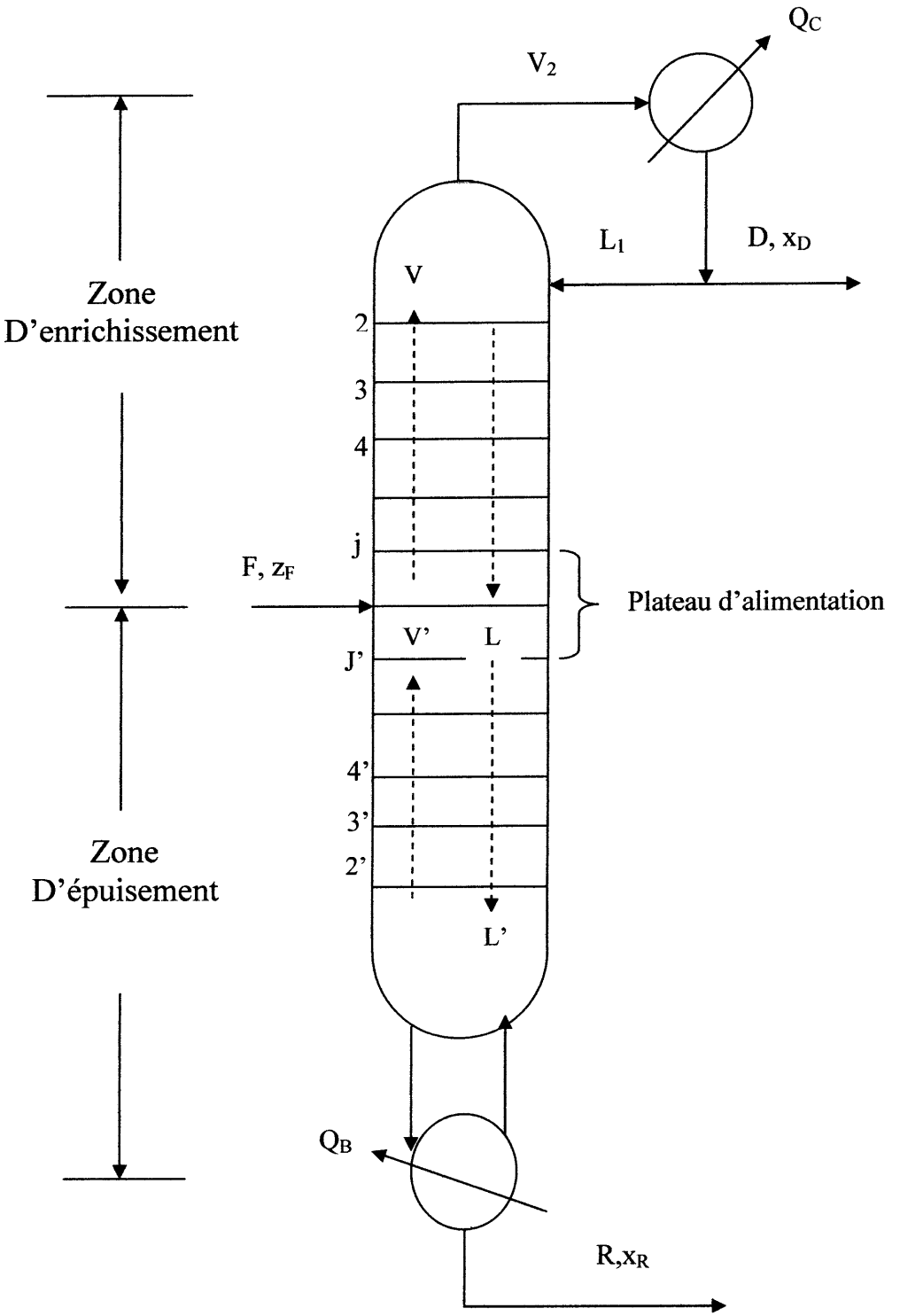


Figure I.1 : colonne de distillation.

La colonne est séparée en deux zones :

- La zone d'enrichissement au-dessus de l'alimentation ou section de rectification ;
- La zone d'épuisement en dessus du plateau d'alimentation ou appelée section d'appauvrissement.

En tête de la colonne la vapeur est condensée pour obtenir le distillat, une partie du distillat est éliminée produit de tête D tandis que, pour augmenter les performances, le reste du distillat est renvoyé L_1 au plateau supérieur.

- Le liquide quittant le plateau inférieur parvient au bouilleur ou il est chauffé et partiellement vaporisé ;
- La vapeur venant du bouilleur retourne au plateau inférieur et le liquide qui reste est éliminé comme résidu [2, 3].

I.3 Équilibre liquide-vapeur

Les différents mélanges de liquide peuvent être classés, d'après le nombre de leurs constituants, en mélanges binaires, ternaires... Les mélanges binaires, qui ont été les plus étudiés, seront seuls considérés ici. On distingue, d'après la solubilité réciproque des constituants :

- les mélanges homogènes comprenant :

– les mélanges normaux parmi lesquels on rencontre les mélanges idéaux ;

– les mélanges anormaux ou azéotropiques.

- les mélanges hétérogènes :

– Mélanges idéaux : On peut considérer qu'un mélange est idéal lorsque les écarts par rapport à la loi de Raoult sont faibles; ils sont constitués par des corps de même structure chimique (par exemple : hydrocarbures saturés isomères) ;

–Mélanges hétérogènes : Dans ces mélanges, qui s'écartent totalement de l'état idéal, la solubilité réciproque des deux constituants liquides peut être partielle ou nulle [4].

I.4 Equation de bilan

Des bilans peuvent être établis pour l'ensemble de la colonne, pour un plateau observé individuellement ou pour une zone de fonctionnement de la colonne par

convention, nous numérotons les plateaux à partir du haut de la colonne son point de bulle.

Pour simplifier l'étude, on considère que la colonne fonctionne à pression constante, l'équilibre est atteint sur chaque étage, la condensation est totale et le mélange binaire alimenté est à son point de bulle [5].

I.4.1 Bilan sur toute la colonne

- Bilan de matière globale : $F=D+R$ **I.1**
- Bilan de matière partiel : $F\,z_F=D\,x_D+R\,x_R$ **I.2**
- Bilan d'énergie : $F\,h_F+Q_B=D\,h_D+R\,h_R+Q_C$ **I.3**

I.4.2 Bilan de matière par zones :

I.4.2.1 Bilan sur la zone d'enrichissement

- Bilan de matière globale : $V_{j+1} - L_j = D$ **I.4**
- Bilan de matière partiel : $V_{j+1}y_{j+1} - L_j\,x_j = D\,x_D$..... **I.5**
- Bilan d'énergie : $V_{j+1}\,H_{j+1} - L_j\,h_j = D\,h_D + Q_C = ED$ **I.6**

$$E = h_D + \frac{Q_C}{D}$$

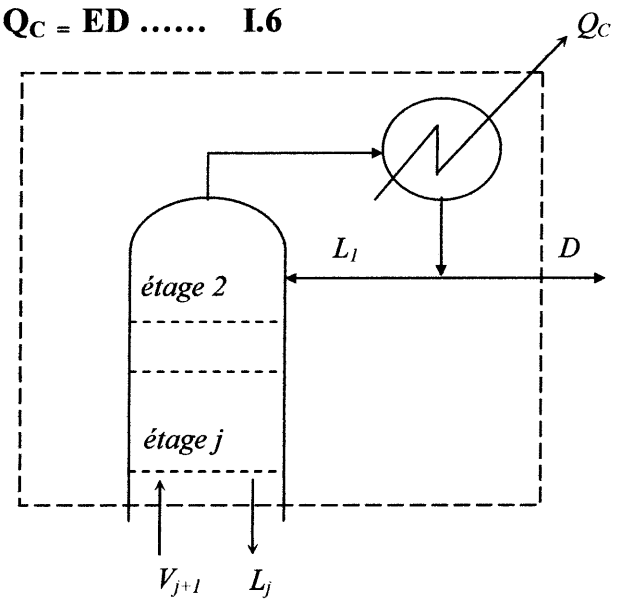


Figure I.2 : zone d'enrichissement.

I .4.2.2 Bilan sur la zone d'épuisement

•Bilan de matière globale : $L'_j - V'_{j+1} = R$ ..... **I.4`**

•Bilan de matière partiel : $L'_j x'_j - V'_{j+1} y'_{j+1} = R\, x_R$ ..... **I.5`**

•Bilan d'énergie : $L'_j h'_j - V'_{j+1} H'_{j+1} = R\, h_R - Q_B = E'R$ ..... **I.6`**

$$E' = h_R - \frac{Q_B}{R}$$

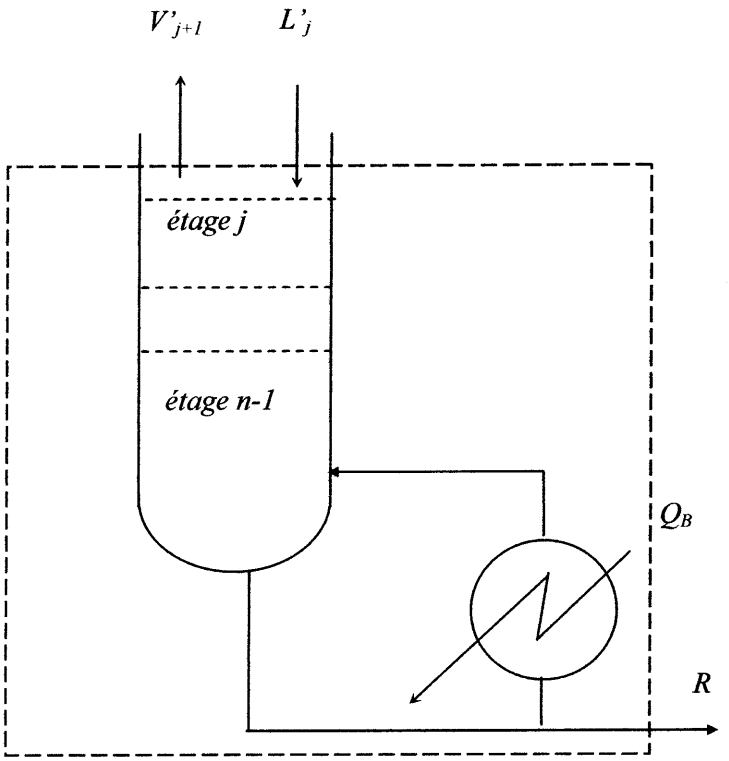


Figure I.3 : zone d'épuisement.

I.5 Méthodes graphiques d'étude de la distillation

Ces méthodes sont fondées sur la relation entre les courbes d'équilibre liquide-vapeur et les courbes opératoires.

I.5.1 Méthode de McCabe –Theile

Cette méthode, la plus utilisée bien que peu rigoureuse, présente l'avantage de la simplicité et de ne nécessiter que peu de données. Elle peut être appliquée à des mélanges binaires non idéaux pour lesquels la ligne d'équilibre doit être obtenue par des déterminations expérimentales et non par le calcul.

L'utilisation de la méthode McCabe-Thiele suppose un certain nombre de conditions qui sont réalisées dans de nombreuses applications pratiques.

- ✓ Les échanges de chaleur résultants des différences de température entre la tête et la base de la colonne sont négligeables ;
- ✓ la colonne (parfaitement calorifugée) fonctionne adiabatiquement, c'est à- dire sans échange de chaleur avec l'extérieur ;
- ✓ le mélange des composants est athermique (chaleur de mixtion nulle) ;
- ✓ l'alimentation en liquide se fait à sa température d'ébullition ;
- ✓ les équilibres sont réalisés sur chaque plateau ;
- ✓ les chaleurs de vaporisation moléculaires des deux constituants sont égales.

McCabe-Thiele ont montré (figure I.4) que la relation entre la composition du liquide du premier plateau, la composition des vapeurs et le nombre des plateaux pouvait être exprimée par un diagramme comprenant [4]:

– une droite opératoire d'enrichissement de pente $\frac{r}{1+r}$ passant par le point (x_D, y_D) ($x_D = y_D$) et qui a pour ordonner à l'origine : $\frac{1}{1+r} x_D$.

De ce fait, les équations de bilans se modifient et on obtient les relations suivantes :

$$y_{j+1} = \frac{r}{1+r} x_j + \frac{1}{1+r} x_D \quad \text{..... I.7}$$

Où r est une constante qui représente le taux de reflux défini par : r = L/D.

– une droite opératoire d'épuisement (qui passe par x_W), la pente de cette droite est le rapporte $\frac{1+r'}{r'}$ et son ordonnée à l'origine est $-\frac{1}{r'}x_R$.

De manière analogie, l'expression de la droite opératoire dans la section d'épuisement s'exprimer comme suit :

$$y`_{j+1} = \frac{1+r'}{r'}x`_j - \frac{1}{r'}x`_R \quad \text{.....} \quad \mathbf{I.7`}$$

Où r`est une constante qui représente le taux de remouillage défini par r`=V`/R.
Les deux droites opératoires se coupent en un point correspondant à l'alimentation de la colonne.

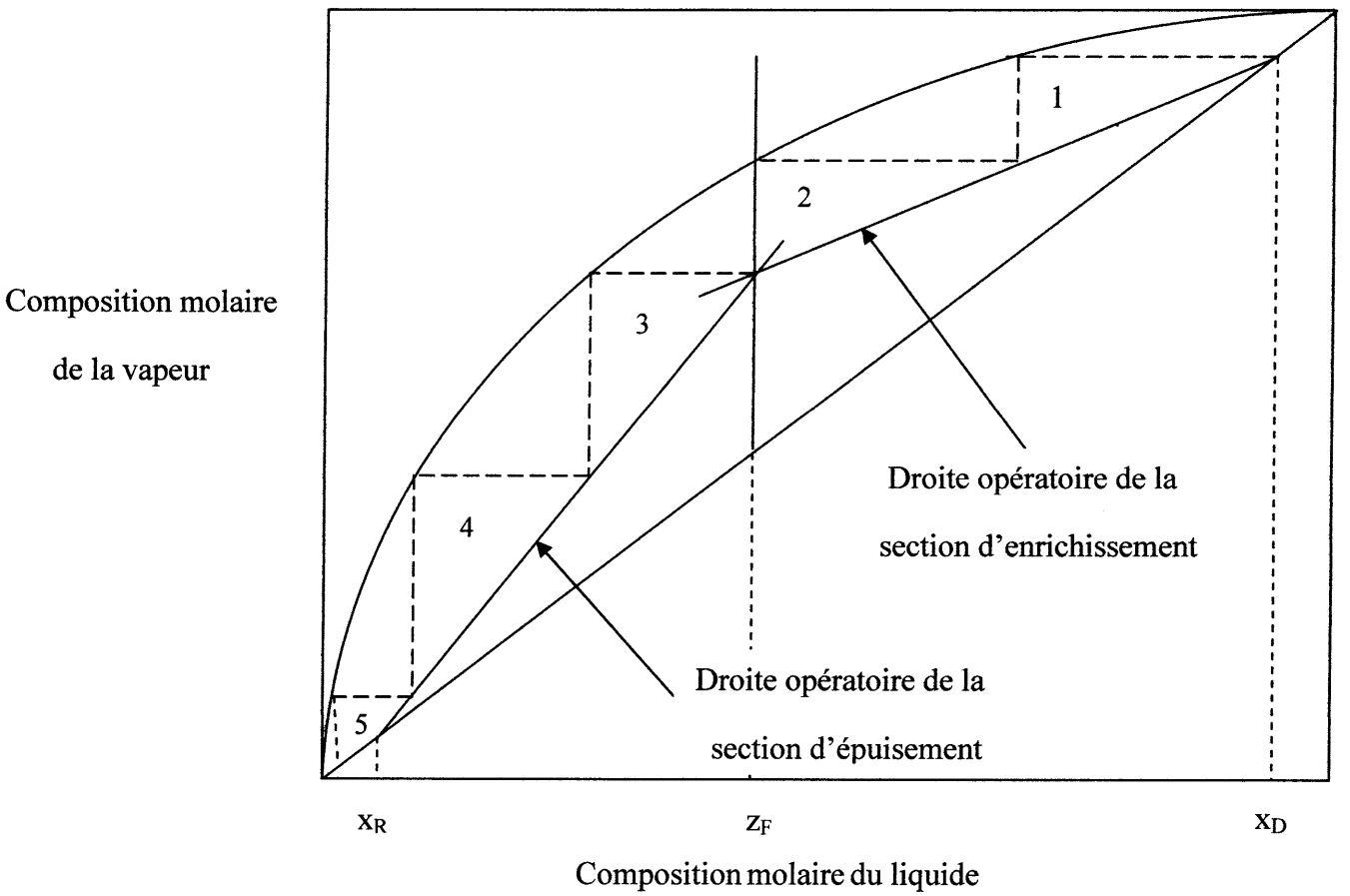


Figure I.4: diagramme de McCabe–Thiele.

– une courbe d'équilibre, représentant la composition de la vapeur s'élevant de chaque plateau, en fonction de la composition du liquide se trouvant sur le plateau.

On trace à partir de x_D une ligne en escalier comprise entre les lignes opératoire et d'équilibre (on représente les vaporisations se produisant sur chaque plateau par des segments de droites verticales et les condensations par des segments de droites horizontales). Chaque palier correspond à un plateau théorique [4].

Le rapport entre le liquide descendant et le distillat est un facteur essentiel pour la séparation :

I.5.1.1 Reflux total

A reflux total **(D=0),** le taux tend vers l'infini et la pente $\frac{r}{1+r}$, de la droite opératoire de la section d'enrichissement tend vers 1. À reflux total, les droites opératoires des sections d'enrichissement et d'épuisement se confondent avec la bissectrice et leur point d'intersection ne dépend ni de la composition de l'alimentation, ni de la position de la droite d'alimentation [5].

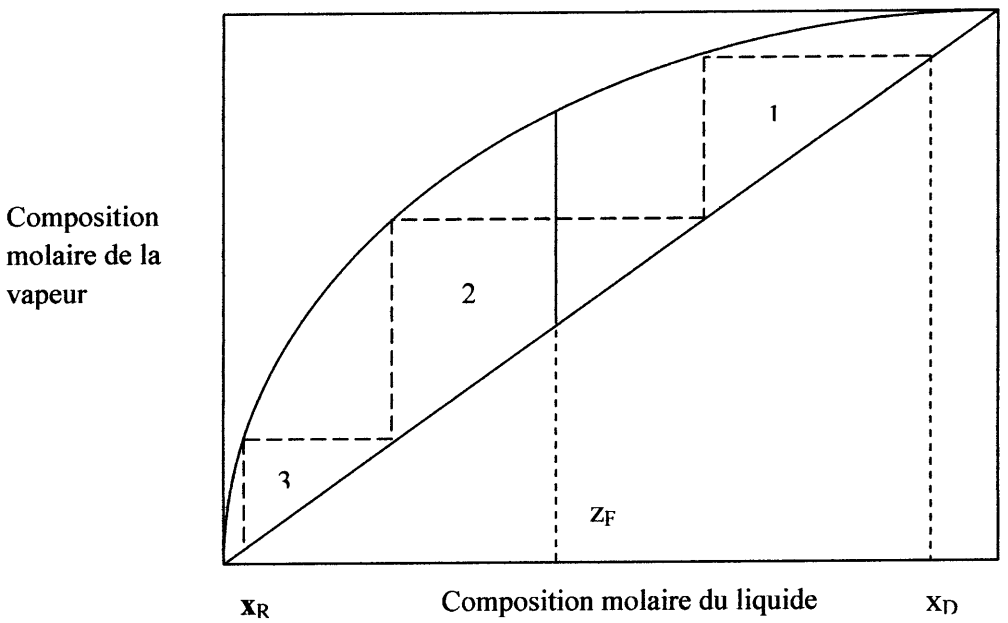


Figure I.5: diagramme de McCabe–thiele pour un taux de reflux total.

I.5.1.2 Reflux minimal

À un taux de reflux minimal correspond un nombre infini de plateaux .Au fur et à mesure que la valeur de **r** diminue, la pente de la droite opératoire d'enrichissement $\frac{r}{1+r}$, décroit et l'intersection de cette droite d'alimentation s'approche de la courbe d'équilibre. Si le taux de reflux continus à diminuer, on atteint un (point d'étranglement) et la droite opératoire d'enrichissement coupe, en ce point, la courbe d'équilibre.

Le nombre de plateaux théoriques devient alors infini. Dans ces conditions, le taux de reflux minimal peut être déterminé à partir de la pente de la droite opératoire d'enrichissement, $r_{min}/(r_{min}+1)$, ou r_{min} est le taux de reflux minimal [5].

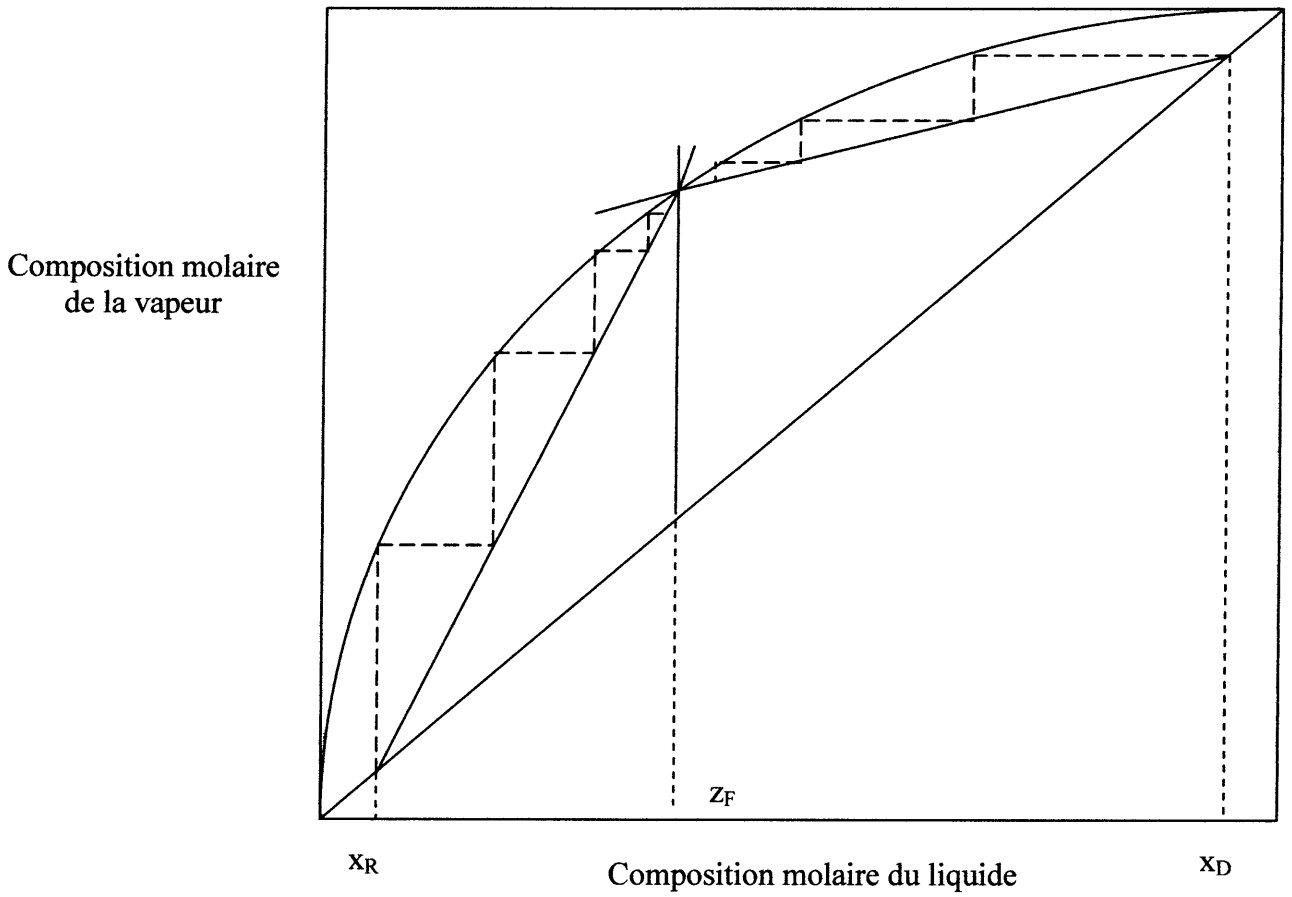


Figure I.6: diagramme McCabe-Thiele pour un taux de reflux minimal.

I.5.2 Méthode de Ponchon –Savarit

Ce diagramme donne la représentation la plus complète de l'équilibre liquide - vapeur d'un mélange binaire exploite les bilans de matière, les bilans d'énergie [6 ,7]. Il est constitué essentiellement par les deux courbes donnant les enthalpies du liquide (courbe de rosée) et de la vapeur saturée (courbe d'ébullition) en fonction des compostions x_i et y_i.

Les compositions à l'équilibre sont reportées sur ces courbes. À chaque point de la courbe d'enthalpie du liquide $h = f(x_j)$ correspond un point de la courbe d'enthalpie de la vapeur $H= f(y_j)$ [4].

Dans ce cas, les équations de bilan s'établissent comme suit :

- Pour la section d'enrichissement : D'après les équations I.4, I.5, I.6 on trouve :

$$\frac{x_D - y_{j+1}}{y_{j+1} - x_j} = \frac{E - H_{j+1}}{H_{j+1} - h_j} \ldots\ldots\ldots\ldots \text{I.8}$$

La relation I.8 indique que toutes les droites opératoires de la section d'enrichissement aient un point commun correspond au pôle opératoire P (x_D, E).

- Pour la section d'épuisement : d'après les équations I.4`, I.5`, I.6n trouve :

$$\frac{X'_R - X'_j}{X'_j - Y'_{j+1}} = \frac{h'_j - E'}{H'_{j+1} - h'_j} \ldots\ldots\ldots\ldots \text{I.8}'$$

La relation I.8` indique que toutes les droites opératoires de la section d'épuisement aient un point commun correspond au pôle opératoire P ` (x_R, E`).

La figure I.7 montre la construction de Ponchon-Savarit pour une distillation d'un mélange binaire.

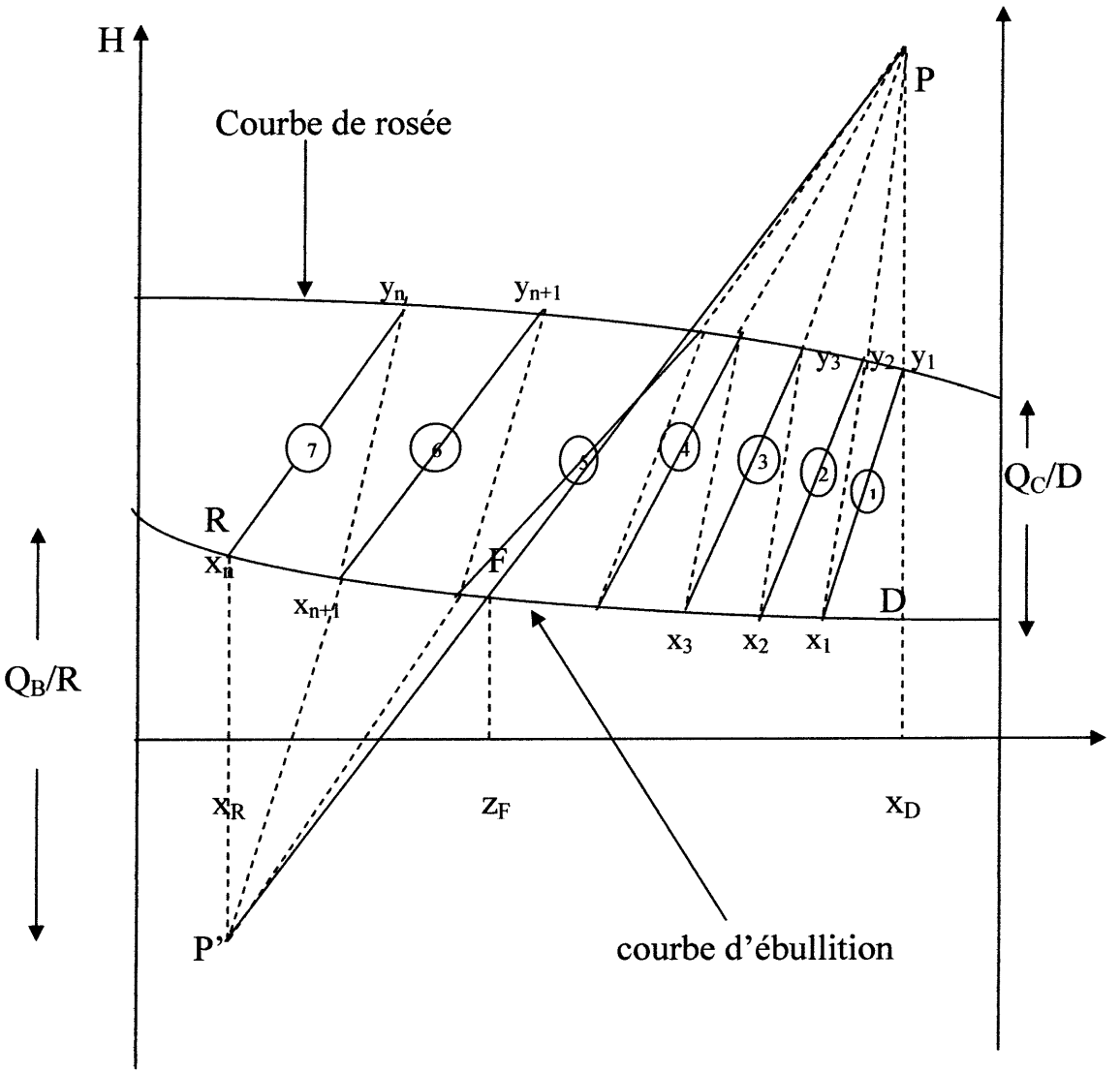


Figure I.7 :construction de Ponchon -Savarit

Sur ce diagramme, un plateau théorique est représenté par une droite de conjugaison (isotherme) joignant un point de la courbe h d'abscisse x_j , avec un point de la courbe H d'abscisse y_j, ces points étant obtenu au moyen de la courbe d'équilibre. Les droites reliant les points représentant, d'une part dans la section d'enrichissement, et d'autre part dans la section d'épuisement, les x_j et les y_{j-1}, sont concourantes [4].

En positionnant sur le diagramme les points x_D et x_R correspondant aux compositions finale et initiale, on décide ensuite d'une valeur pour le reflux qui permet ensuite de calculer Q_C en écrivant une équation de bilan énergétique. Le point P (pôle) représente donc l'enthalpie de la vapeur à condenser Q_C et P' l'enthalpie fournie au rebouilleur Q_B [4].

Le point F de composition connue, ici à sa température d'ébullition, qui représente l'enthalpie du liquide d'alimentation est placé sur le diagramme; on trace la droite PF dont le prolongement coupe la verticale d'abscisse x_R en P' [4].

Partant verticalement du pôle P, on croise la courbe de rosé au point (y_2= x_D, E) dont la composition x_2 en équilibre avec y_2 peut être déterminée à l'aide de la courbe de conjugaison.

Après avoir localisé le point (x_2, h_2), on trace la droite opératoire passant par (x_2, h_2) et le pôle opératoire P, l'intersection de cette dernière avec la courbe de rosée présente le point (y_3, H_3).

En utilise ce pôle jusqu'à ce que la zone d'enrichissement soit terminée, puis en continu de la même méthode avec le pôle P'.Les droites joignant les compositions x_n, y_n, présentent les plateaux théoriques.

I.6 Irréversibilités thermodynamiques dans une colonne à distiller

Tous les procédés de séparation nécessitent un apport énergétique au moins égal à la différence d'enthalpie libre de Gibbs entre l'état final et l'état initial. Comme tous procédés réels, l'apport d'énergie, qu'il soit de type mécanique ou thermique, s'accompagne d'irréversibilités diminuant le pouvoir séparateur d'une colonne [8].

Le procédé ayant le meilleur rendement énergétique est celui qui crée le moins d'entropie [3], c'est-à-dire celui qui se rapproche le plus de la réversibilité thermodynamique. La distillation est un procédé potentiellement réversible, elle fait intervenir des phénomènes relevant: des équilibres de phases, du transfert de matière, du transfert de chaleur.

Ces phénomènes peuvent se rapprocher de la réversibilité thermodynamique moyennant des modifications structurales ou en changeant totalement les conditions opératoires [8].

I.7 La production d'entropie

La colonne à distiller peut être considérée comme une machine thermique qui reçoit une énergie au niveau du bouilleur et rejette une partie au niveau du condenseur pour séparer des mélanges liquides. Cette séparation est affectée par des irréversibilités thermodynamiques qui se traduisent par une production d'entropie qui fait diminuer le rendement énergétique de la colonne.

L'application d'un deuxième principe de la thermodynamique sur la colonne de la distillation à distiller permet d'évaluer la production d'entropie comme suit :

$$\sigma = Rs_R + Ds_D - Fs_F - \sum_{j=1}^{n} \frac{Q_j}{T_j} \quad \text{.....I.9}$$

Il devient possible de procéder à l'étude de l'efficacité énergique des systèmes [9,10]. Ceci permet d'aboutir à de nouvelles méthodes moins coûteuses et ayant un faible impact sur l'environnement [11, 12, 13].

CHAPITRE II

SIMULATION D'UNE COLONNE DE DISTILLATION

II .1 Introduction

La simulation peut être définie comme l'utilisation d'un modèle mathématique pour générer une description du comportement du système son avantage principal est qu'elle fournie une bonne représentation du comportement du système réel, cette représentation peut être difficile à atteindre en procédant à l'expérimentation .La simulation peut être classée comme une méthode peu coûteuse et sûre.

Le programme de simulation d'une colonne de distillation séparant le mélange binaire non idéal ammoniac- eau est réalisé par langage de programmation FORTRAN77.Ce programme englobe d'une part l'estimation de tous les données thermo -dynamiques ainsi ce qui permet la détermination de toutes les paramètres interne de fonctionnements de la colonne. Elle basé sur le calcul matriciel pour résoudre les équations de bilan par l'inversion d'une matrice tri diagonale.

II.2 Modélisation d'une colonne de distillation

Les caractéristiques du système sont :

- La colonne est isobare ;
- Les phases liquides sont en équilibre thermodynamique avec les phases gazeuses ;
- L'alimentation est à l'état saturée à la même pression que la colonne ;
- La condensation est totale.

II.2.1 Calcul des équilibres liquide-vapeur

Le calcul des équilibres liquide-vapeur est très souvent utilisé par les ingénieurs pour l'étude des séparations industrielles. Les applications les plus courantes sont les calculs des points d'ébullition, de rosée et de vaporisation partielle de mélanges dans diverses conditions [14].

Le calcul des distillations est basé sur Les propriétés thermodynamiques, pression P, température T, composition liquide x, composition vapeur y, enthalpie liquide h, enthalpie vapeur H, entropie liquide s et entropie vapeur S du mélange ammoniac – eau.

Dans ce travail les grandeurs thermodynamiques du mélange ammoniac-eau sont calculées par la corrélation de Ziegler et Trepp [15].

II.2.2 Calcul de la colonne à distiller

Les méthodes utilisées dans la pratique consistent soit en calculs d'équilibre liquide vapeur successifs simulant l'établissement d'un régime stationnaire dans une colonne, soit en une solution de toutes les équations de bilan et d'équilibre au moyen d'une méthode mathématique itérative.

La méthode des équilibres successifs a l'avantage principal d'offrir une convergence sure et l'inconvénient de demander des temps de calcul très longs .elle consiste à calculer des équilibres liquide-vapeur à pression et enthalpie donnée par la méthode exposée.

Parmi les méthodes itératives ne simulant pas une mise en régime, on trouve d'abord celles qui généralisent les méthodes graphiques applicables aux mélanges binaires. Elles ont fait l'objet de publication par HOLLAND (1963), HANSON (1962).elles ont l'avantage majeur de permettre des calculs en un temps très court, contre balancé par l'inconvénient d'une convergence peu sure. FRIDAY(1964) a fait une revue critique de toutes ces méthodes.

L'utilisation du calcul matriciel pour résoudre l'équation de bilan par l'inversion d'une matrice tri diagonale permet d'éviter certains inconvénients de ces méthodes tels que la cumulation des erreurs, la nécessite de plateaux de raccordement, la distinction entre les constituants qui se retrouvent dans l'un ou dans tous les mélanges sortants de la colonne ; il permet de traiter facilement les problèmes d'alimentations et de soutirages multiples [14].

La résolution d'équation nécessite autres méthodes de calcule itérative telle que la méthode de Newton Raphson qui applique sur les systèmes d'équations non-linaire de la convergence très lente il est mieux travaillé par la méthode de la matrice tri diagonale lorsqu'elle très bonne qualité de stabilité, de précision et de temps d'exécution [6,16].

II.2.2.1 Équation MESH

Les méthodes rigoureuses nécessitent la résolution sur tous les étages de la colonne des équations de bilans **m**atières (M), d'équilibre liquide-vapeur (E), des sommations (S) et de bilan d'énergie (**H**eat) (H) [4,1].

Ces équations sont connues sous le nom **MESH**. Les premières méthodes de résolution du problème (dans les années 30) se faisaient par itération, à la main, étage par étage, équation par équation. Avec les ordinateurs, ces méthodes ont cependant rencontré des problèmes de convergence.

On a développé des méthodes (itératives elles aussi) de résolution par composant (et non plus par étage) qui conduisent à la résolution de système d'équations linéaires dont la solution s'obtient rapidement par inversion de matrices tri-diagonale [17,18].

Le schéma d'une colonne à distiller de n étage est présenté dans la figure II.1, l'étage 1est le condenseur et l'étage n le bouilleur, les phases liquides L_j et vapeur V_j qui sortant de l'étage j sont équilibre thermodynamique, les débits molaires correspondants sont L_{j-1} et V_{j+1} sur chaque étage j on prévoit une alimentation F_j, un apporte de chaleur Q_j, un soutirage de phase liquide U_j et de phase vapeur W_j.

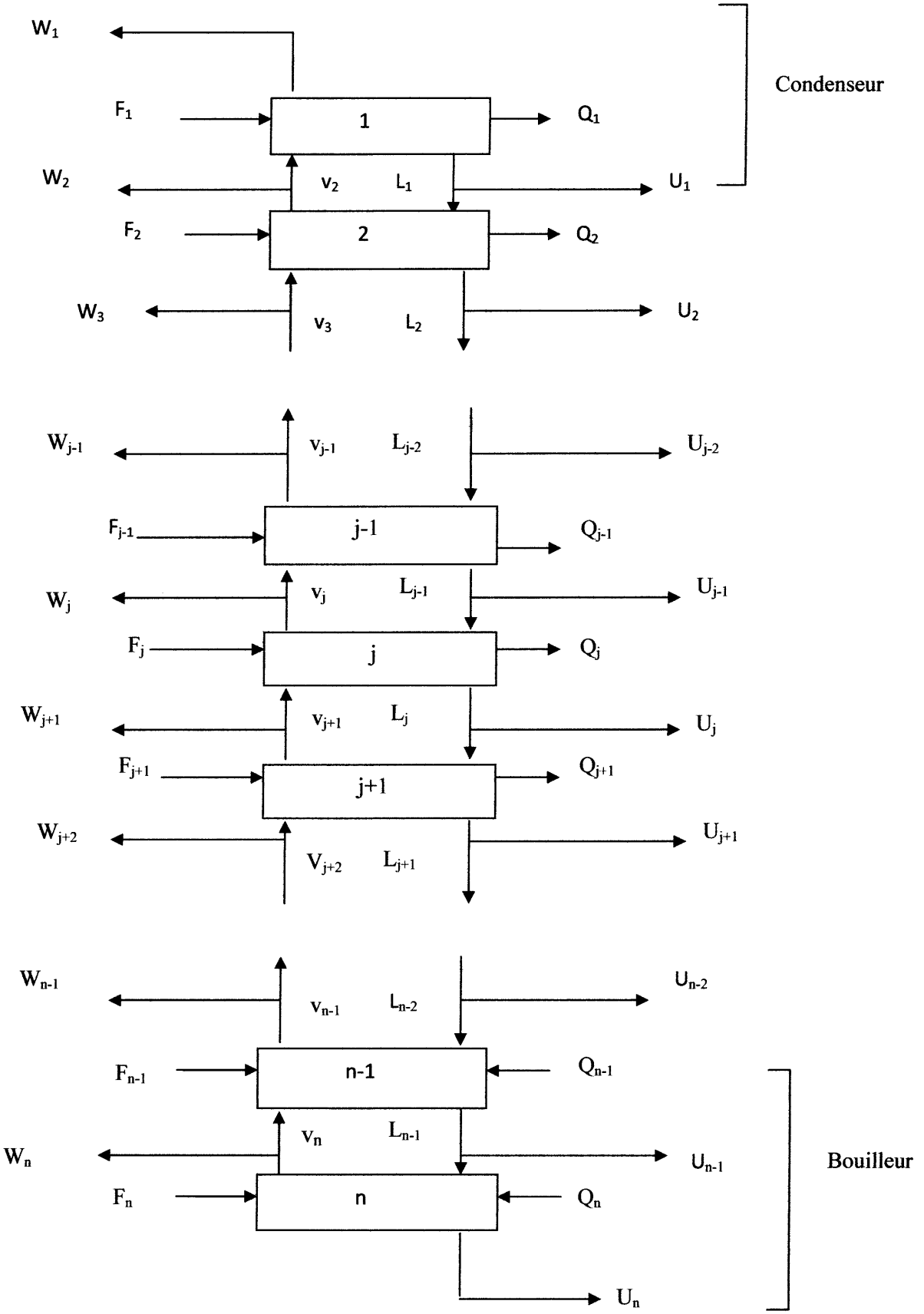


Figure II.1 : schéma d'une colonne de distillation

Les inconnues du problème sont les compositions des liquides et des vapeurs circulant dans la colonne dont les valeurs exprimées en fractions molaires de chaque constituant sont notées x_{ij} et y_i. Les équations MESH sont écrites comme suit :

Équation de bilan matière pour chaque constituant sur chaque plateau

$$\frac{dM}{dt} = 0$$

$$M = L_{j-1}x_{i,j-1} - (V_j+W_j)\, y_{i,j} - (L_j+U_j)\, x_i + V_{j+1}y_{i,j+1} + F_j\, z_{ij}=0 \;\ldots\ldots\; \text{II.1}$$

Relation d'équilibre liquide –vapeur(E-équation)

$$\frac{dE}{dt} = 0$$

$$E_j= y_{ij} - K_{ij}\, x_{ij}=0 \;\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\; \text{II.2}$$

Sommation des compositions

- Pour la phase vapeur

$$\frac{dS_y}{dt} = 0$$

$$(Sy)_j= \sum_{i=1}^{m} yij - 1 = 0 \ldots\ldots \;\; \text{II.3.a}$$

- Pour la phase liquide

$$\frac{dS_x}{dt} = 0$$

$$(Sx)_j=\sum_{i=1}^{m} xij - 1 = 0 \;\ldots\ldots\; \text{II.3.b}$$

Équation de bilan d'énergie

$$\frac{dH_j}{dt} = 0$$

$$H_j = L_{j-1}h_{j-1} - (V_j+W_j)\, H_j - (L_j+U_j)\, h_j + V_{j+1}H_{j+1} + F_jH_{Fj} - Q_j=0 \ldots\ldots \;\; \text{II.4}$$

II.2.2 .2 Méthodes de la matrice tri diagonale

La distribution de produits pour la distillation d'une colonne peut être calculée par cet algorithme de matrice tri diagonale [16, 19, 6,13].

Une méthode itérative simple, rapide et stable numériquement .Est développée par Wang et Henke pour résoudre les problèmes de distillation à plusieurs colonnes [17,20].

Equation (II.1) et (II.2) sont maintenant réunies et sont exprimée comme des fonctions par un bilan matière global de toutes les étapes du condenseur à travers l'étage j.

$$L_j = V_{j+1} + \sum_{K=2}^{j} (F_K - W_K - U_K) - D \quad \text{.....} \quad \text{II.5}$$

Ou : $D = V_1 + U_1$ II.6

L'équation MESH est alors réduite à une forme de matrice tri diagonale :

$$Bx_{i1} + Cx_{i2} = D_1 \quad \text{.....} \quad \text{II.7}$$

$$A_j x_{i,j-1} + B_j x_{ij} + C_j x_{i,j+1} = D_j \quad \text{.....} \quad \text{II.8}$$

$$A_n x_{i,n-1} + B_n x_{in} = D_n \quad \text{.....} \quad \text{II.9}$$

$$\begin{bmatrix} B_1 & C_1 & 0 & 0 & 0 & & & & \cdots & 0 \\ A_2 & B_2 & C_2 & 0 & 0 & & & & \cdots & 0 \\ 0 & A_3 & B_3 & C_3 & 0 & & & & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & & & & & & & & \cdots \\ \cdots & & & & & & & & & \cdots \\ \cdots & & & & & & & & & \cdots \\ \cdots & & & & & & & & & \cdots \\ \cdots & & & & & & & & & \cdots \\ 0 & \cdots & & & & 0 & A_i & B_i & C_i & 0 \\ 0 & \cdots & & & & 0 & 0 & A_{n-1} & B_{n-1} & C_{n-1} \\ 0 & \cdots & & & & 0 & 0 & 0 & A_n & B_n \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} x_{ii} \\ x_{i2} \\ x_{i3} \\ \cdots \\ \cdots \\ \cdots \\ \cdots \\ \cdots \\ x_{ii} \\ x_{in-1} \\ x_{in} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_1 \\ D_2 \\ D_3 \\ \cdots \\ \cdots \\ \cdots \\ \cdots \\ \cdots \\ D_i \\ D_{n-1} \\ D_n \end{bmatrix}$$

Dont

- Pour le condenseur (j=1) :

$A_1=0$

$B_1= - (L_1 + U_1 + W_1 K_{i1})$

$C_1=V_2 K_{i2}$

$D_1=0$

- Pour le plateau j ($2\leq j \leq n-1$) :

$A_j = L_{j-1}$
$B_j = - [(V_j + W_j) K_{ij} + (L_j + U_j)]$
$C_j = V_{j+1} K_{ij+1}$
$D_j = -F_j zj$

- Pour le bouilleur (j=n) :

$A_n= Ln-1$
$B_n= - [(W_n + V_n) K_{in}+ U_n]$
$C_n = 0$
$D_n = 0$

Pour résoudre le système et déterminer la composition liquide $x_{i\,j}$, les grandeurs suivantes : le nombre d'étages n, la pression P de la colonne, l'alimentation F, sa composition z_F les débits de soutirage U_j, W_j doivent être spécifiées. On initialise les profils de la température T_j et les débits de vapeur V_j.

Pour : $(2 \leq j \leq n-1)$

$$V_{j+1} = \frac{Q_j - F_j(h_{Fj} - h_j) + L_{j-1}(h_j - h_{j-1}) + (V_j + W_j)(H_j - h_j)}{H_{j+1} - h_j} \quad \text{..... II.10}$$

Pour le condenseur : $V_2 = U_1 + L_1$ II.11

Le sous-programme de résolution de la matrice tri diagonale par élimination gaussienne est disponible au niveau de la bibliothèque IMSL du FORTRAN77 sous le nom DLSLTR.

L'expression du débit du liquide est déduite à partir des équations II.1 et II.2 :

$$L_j = V_{j+1} + \sum_{k=2}^{j}(F_k - W_k - U_k) - (W_1 + U_1) \quad \text{..... II.12}$$

Une fois les compositions x_{ij} sont calculées, on détermine le nouveau profil de température et les valeurs des constantes d'équilibre K_{ij} ainsi que les débits de la vapeur donnés par les relations suivantes :

II.2.2.3 Imposition des puretés x_1 et x_n

La méthode telle que décrite par Wang et Henke nécessite en particulier de fixer le débit du reflux L_1, les compositions x_1 et x_n seront des résultats de calcul. Afin de fixer les valeurs de x_1 et x_n une adaptation de la méthode était nécessaire. De cette façon, il devient possible de comparer différentes colonnes qui produisent un distillat et un résidu avec les compositions voulues.

Pour une colonne avec une seule alimentation et produisant un distillat et un résidu :

$$F = U_1 + U_n \quad \text{..... II.13}$$

$$Fz_F = U_1 x_1 + U_n x_n \text{ ..... II.14}$$

On déduit alors U_1 et U_n comme suit

$$\begin{cases} U_1 = \dfrac{x_n - z_F}{x_n - x_1} F \\ \\ U_n = \dfrac{x_1 - z_F}{x_1 - x_n} F \end{cases}$$

Reste à déduire la valeur du reflux L_1 qui permet d'avoir cette répartition.

D'après la relation (II.11) :

$$L_1 = V_2 - U_1 \text{ ..... II.15}$$

Telle que la valeur de V_2 se déduit à partir de la relation du bilan partielle au niveau du condenseur :

$$V_2 = ((U_1 + L_1)\, x_{i1})\, y_{i2} \text{ ..... II.16}$$

L'expression de la production d'entropie σ dans chaque étage est donnée par la relation :

$$\sigma_j = (U_j + L_j)s_j + (V_j + W_j)S_j - L_{j-1}s_{j-1} - V_{j+1}S_{j+1} - F_j s_j - \frac{Q_j}{T_j} \text{ ..... II.17}$$

La production d'entropie totale peut s'exprimer aussi comme suit :

$$\sigma = \sum \sigma_j \text{ ..... II.18}$$

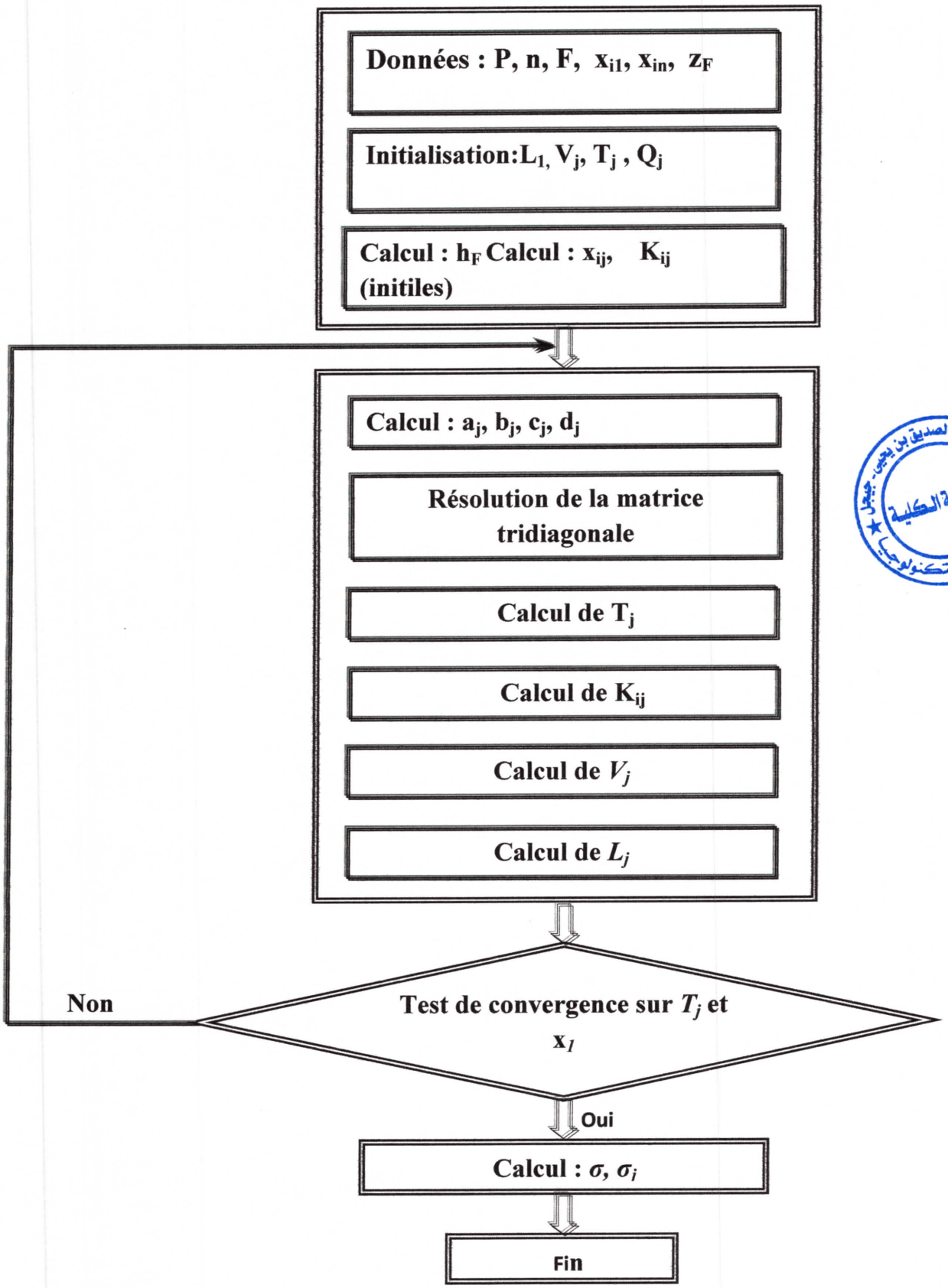
II.3 Simulation du procédé

Le programme informatique permettant d'effectuer la simulation est construit de manière à effectuer les calculs suivant les étapes énumérées ci-dessous [21]

Fixer les valeurs de P, n, F, z_F, x_{il}, x_{in}.

1. En déduire les valeurs de U_1 et U_n.
2. Donner la valeur initiale du L_1 et initialiser V_j , T_j . En déduire les propriétés de l'alimentation, les compositions x_{ij} et la valeur K_{ij} initiales par l'appel du sous-programme de calcul des propriétés DSUBNH3.
3. Début du calcul itératif :
   - 5.1 Calcul des éléments de la matrice tri diagonale.
   - 5.2 Résolution de la matrice tri diagonale par le sous-programme DLSLTR.
   - 5.3 Calcul de T_j par le sous-programme DSUBNH3.
   - 5.4 Calcul de la K_{ij} par le sous-programme DSUBNH3.
   - 5.5 Calcul de V_j par la relation II.10 à l'exception de V_2 qui se calcule par la relation II.11.
   - 5.6 Calcul de L_j par la relation II.12 à l'exception de L_1 qui se calcul par la relation II.15.
   - 5.7 Vérification du teste de convergence qui concerne les températures et la composition x_1 (pour la composition, l'erreur relative doit être inférieure à 0,00001. Le test de convergence pour la température est : $\varepsilon = \sum_{j=1}^{n} (T_j^{(k)} - T_j^{(k-1)} \leq 0{,}01.n$
   - 5.8 Si le test de convergence n'est pas vérifié, reprendre en 5.1.
6. Sortit de la boucle et calcul la production d'entropie dans chaque étage et la production d'entropie totale.
7. Fin du programme.

L'organigramme ci-contre va permettre de suivre la séquence de calcul et de préciser les systèmes d'équations qu'on résout successivement.



جامعة محمد الصديق بن يحيى - جيجل
مكتبة الكلية
كلية العلوم والتكنولوجيا

Figure II.2 : Organigramme du programme.

CHAPITRE III

RÉSULTA DE SIMULATION ET DISCUTIONS

III.1 Introduction

Dans ce chapitre, on présente la discussion des résultats numériques du programme de simulation d'une colonne de distillation d'un mélange ammoniac-eau. On commence parles diagrammes d'équilibre liquide-vapeur (diagramme isotherme, diagramme isobare, diagramme de composition vapeur en fonction du liquide et le diagramme enthalpique),en outre ces résultats sont aussi traduits sous forme graphique pour voir mieux l'évolution des débits liquide, débits vapeur, compositions massiques liquides, températures ainsi que la production d'entropie pour évalué la consommation d'énergie dans les trois colonnes de 7, 9,11 étages sous pression de 10bar,20bar,30bar. Les paramètres fixes de notre étude sont:

- Le débit de l'alimentation F = 1kg.s^{-1}. L'alimentation est introduite à l'étage central à son point de bulle ;
- La composition d'alimentation z_{nf}=0.3 ;
- La composition du distillat x_1= 0.999 ;
- La composition du résidu x_n= 0.001.

III.2 Tracés des diagrammes du mélange ammoniac-eau

L'équilibre liquide-vapeur du mélange ammoniac-eau est représenté par quatre variables intensives : la température(T), la pression(P), la composition massique liquide(x) et la composition massique vapeur (y).

Les propriétés de la solution binaire ont été étudiées et ce sont concrétisées par : le diagramme isobare(pression constante),le diagramme isotherme (température constante), le diagramme de composition vapeur en fonction de celle du liquide et le diagramme enthalpique.

III .2.1 Diagramme isotherme

La figure III.1 présente les diagrammes isothermes du mélange aux températures 303K, 313K et 323K respectivement.

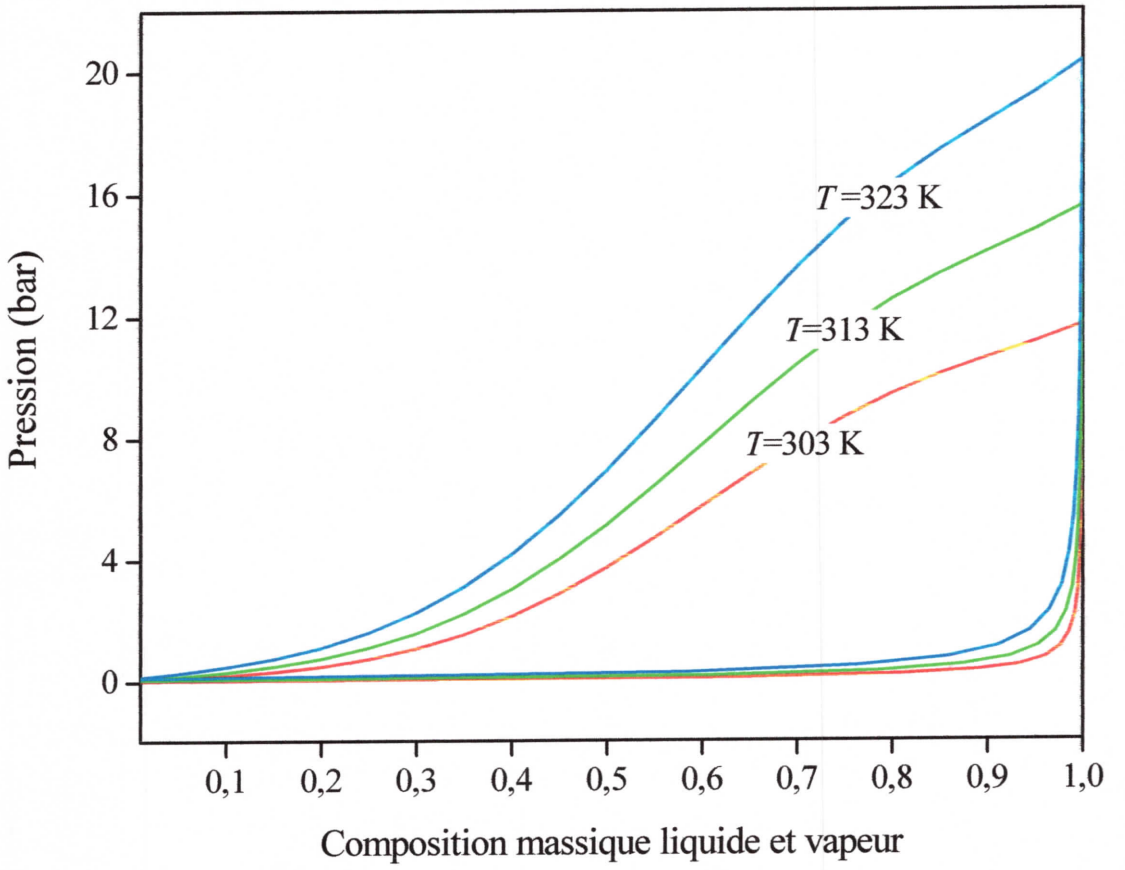


Figure III.1: diagramme isotherme ammoniac –eau.

D'après la figure ci-dessus on remarque que lefuseau est totalement déformépuisla courbe de rosé est pour une large part très voisine de l'un des axes de pression (égaleà 0) et de la composition massique liquide et vapeur (égaleà 1).Cette déformation de fuseau est dueà l'importante différence de volatilité des deux constituants pour le mélange ammoniac-eau.De plus, on constate que les pressions de bulle et de rosé augmentent avec augmentation de la température.

III .2.2 Diagramme isobare

Les diagrammes isobares du mélange aux pressions 10bar, 20bar et 30bar sont respectivement illustrés dans la figure III.2.

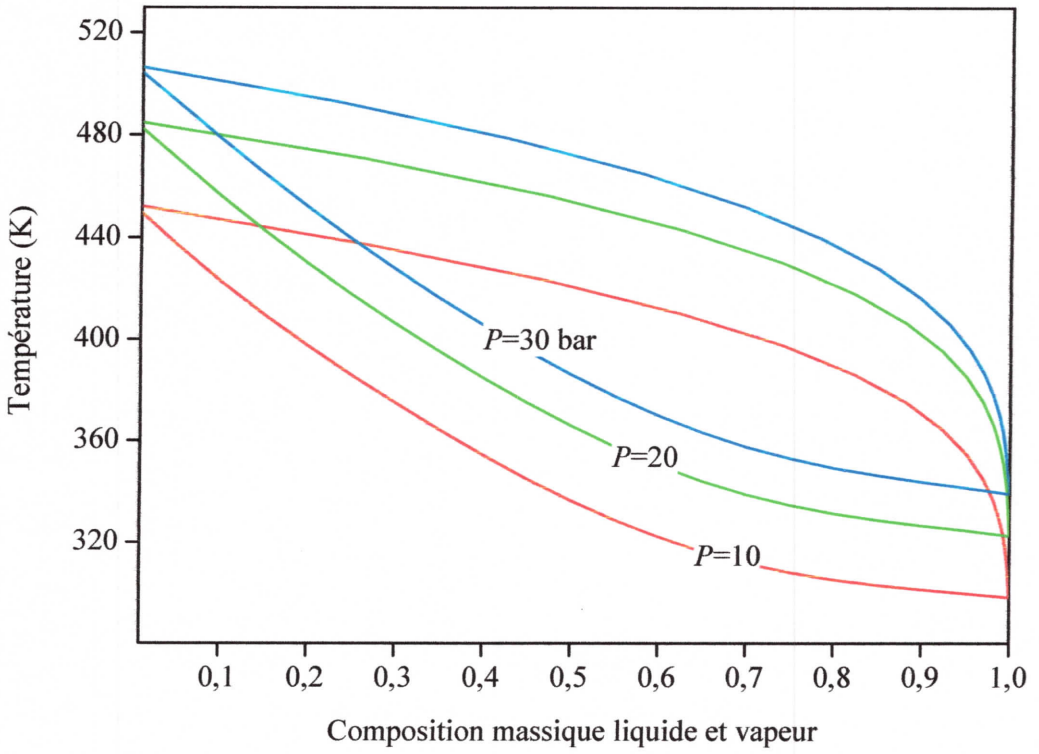


Figure III.2: diagramme isobare eau-ammoniac.

La courbe de bulle qui donne pour chaque teneur massique en ammoniac, la température d'ébullitioncommençante du mélange liquide (point de bulle). Les trois courbes correspondent respectivement aux trois pressions 10, 20,30 bar. Pour chaque pression considérée, le domaine situé au-dessous de la courbe de bulle est le domaine des mélanges liquides.

La courbe de rosée qui donne pour chaque teneur en ammoniac, la température de condensation commençante du mélange gazeux (point de rosée). Les courbes correspondent respectivement aux trois pressions ci-dessus. Pour chaque pression considérée, le domaine situé au-dessus de la courbe de rosée est le domaine des mélanges gazeux surchauffes.

Pour les mélanges zéotropes les courbes de bulle et de rosée n'intersectés que sur les axes, ce qui correspond aux cas de constituants purs aux trois pressions considérées.

III .2.3 Diagramme Composition de la vapeur en fonction de celle du liquide

La représentation des diagrammes de composition de la vapeur en fonction de celle du liquide ammoniac-eau aux pressions 10bar, 20bar, 30bar est donnée par la figure III.3.

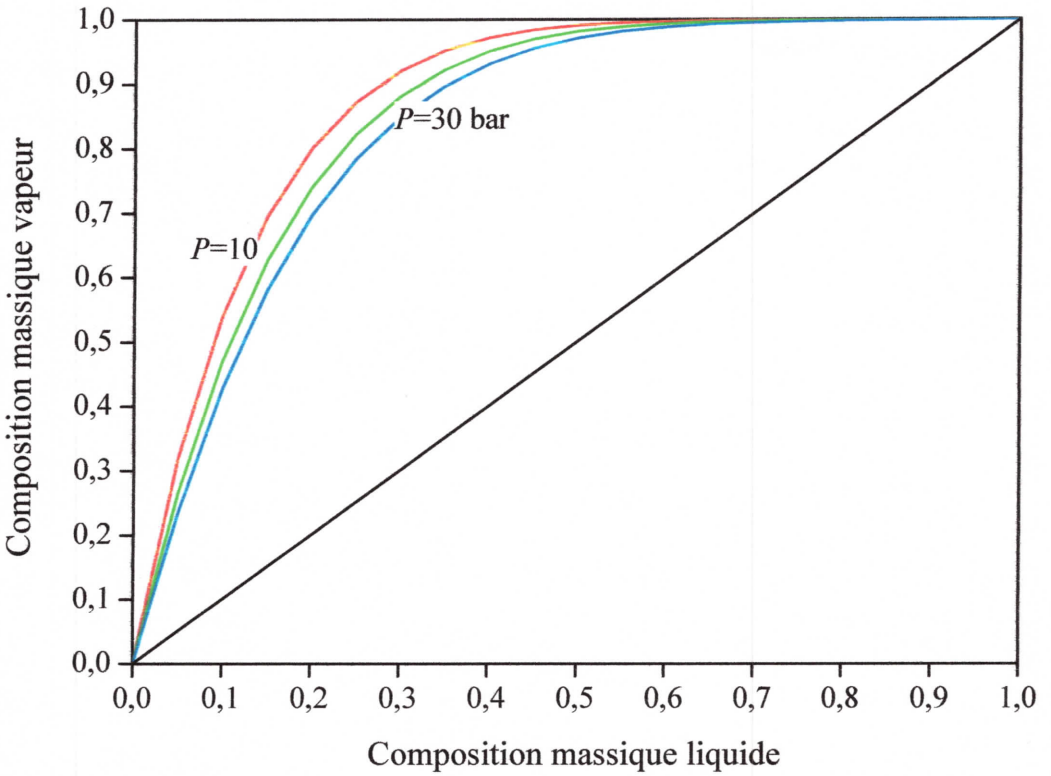


Figure III.3 : Composition de la vapeur en fonction de celle du liquide ammoniac –eau.

On remarque que les diagrammes à un seul fuseau, la relation existe entre la fraction massique de liquide et celle de la vapeur d'ammoniac, pour différentes pressions 10bar ,20bar et 30 bar. Elle montre clairement que lorsque la fraction massique liquide du soluté x dépasse 0,5, la teneur en ammoniac de la vapeur y dépasse 0,95.

III .2.4 Diagramme enthalpique

La Figure III.4 présente les diagrammes enthalpiques de mélange ammoniac-eau aux pressions 10bar, 20bar, 30bar.

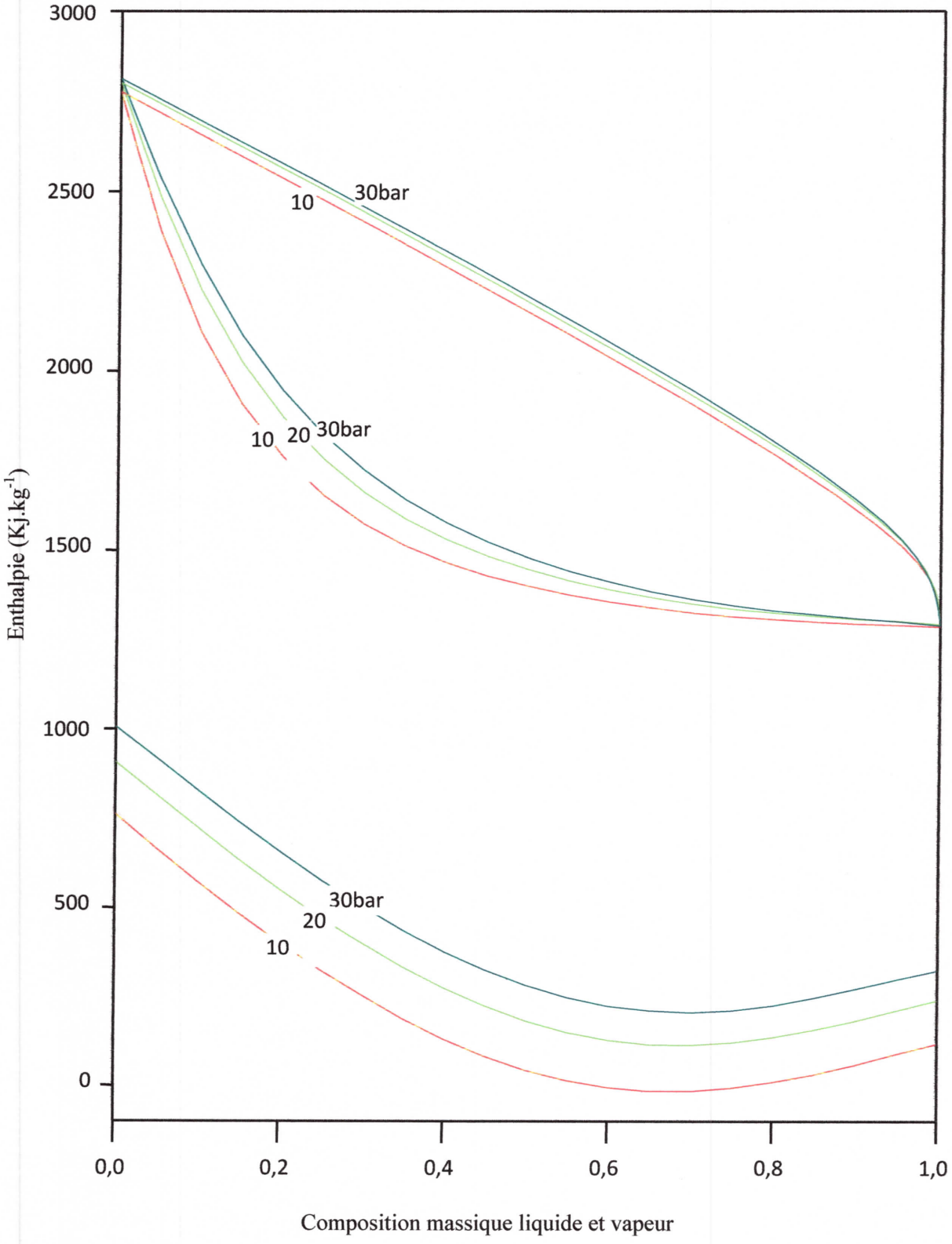


Figure III.4: diagramme enthalpique de mélange ammoniac.

La représentation schématique du diagramme d'équilibre liquide-vapeur de mélange binaire ammoniac-eau est montrée dans la figure ci-dessus, chaque courbe est définie comme :

- Des courbes isobares «de bulle» en forme de selle où le domaine des mélanges liquides sous-refroidis pour la pression considérée est au-dessous de chacune d'elle.
- Des courbes isobares «de rosée» assez étendues et très proche les unes des autres où le domaine des mélanges gazeux surchauffés pour cette pression est au-dessus de chacune d'elles.
- Des courbes isobares de construction qui servent à trouver les compositions d'équilibre des phases liquide et vapeur en présence.

III.3 résultats de simulation de la colonne à distiller

Dans cette partie,nous présentons les résultats de simulation de la colonne de distillation de 7, 9,11 étages d'un mélange ammoniac-eau.

II.3.1 Colonne de 7 étages

Nous proposons ici de présenter les résultats de l'étude d'une colonne de distillation de 7 étages aux pressions de 10bar, 20bar, 30bar.

- **Débit liquide**

La figure III.5 montre les débits liquides dans chaque étage aux pressions de 10bar, 20bar et 30bar.

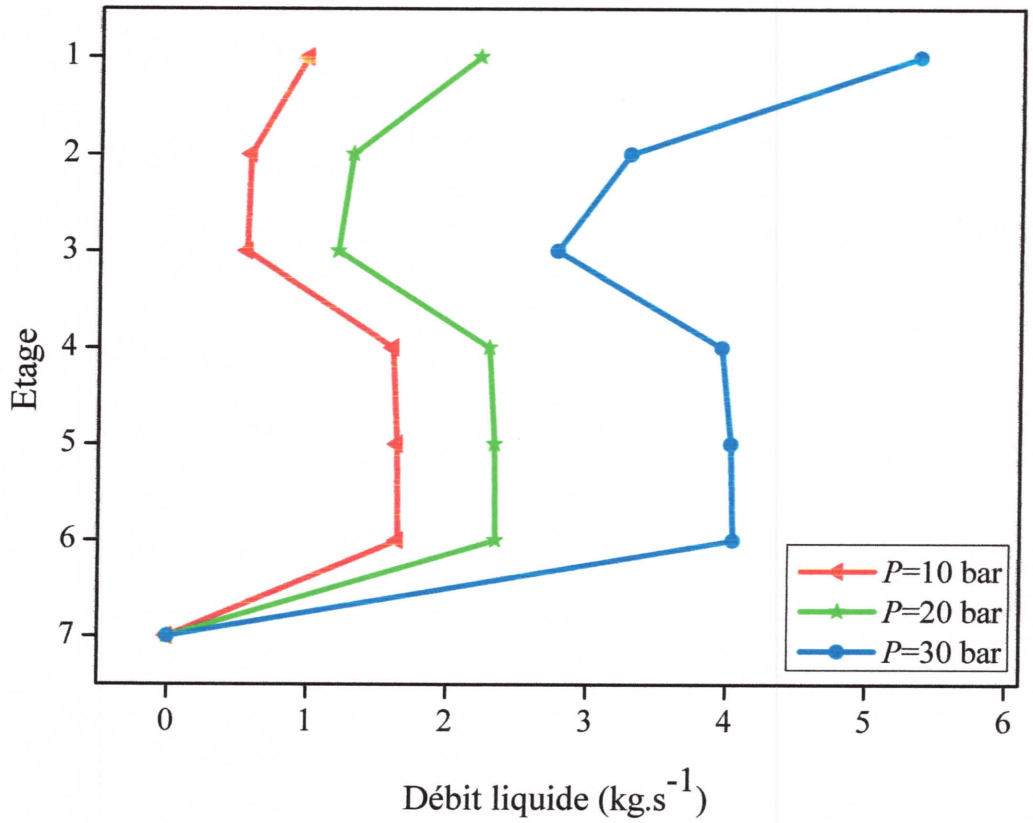


Figure III.5 : Débits liquides dans chaque étage sous différentes pressions.

D'après la figure ci-dessus, on remarque que les débits liquides dans la zone d'enrichissement diminuent progressivement au 3^{éme} étage, puis augmentent jusqu'au plateau d'alimentation, on remarque aussi quedans la zone d'épuisement les débits liquides reste constants au 6^{éme} étage, puis diminuent vers le bas de la colonne.

On note également une augmentation du reflux dans chaque étage si on augmente la pression, le reflux est plus importantà P=30bar qui augmente jusqu'à 5.36Kg.s^{-1} dansle 1er étage par rapport à P=20barqui augmenteà2.215Kg.s^{-1} et P=10bar quiaugmentejusqu'à 0.97Kg.s^{-1} au 1er étage.

- **Débit vapeur**

Les débits vapeurs dans chaque étage aux pressions de 10bar, 20bar et 30bar respectivement se présentent dans la figure III.6.

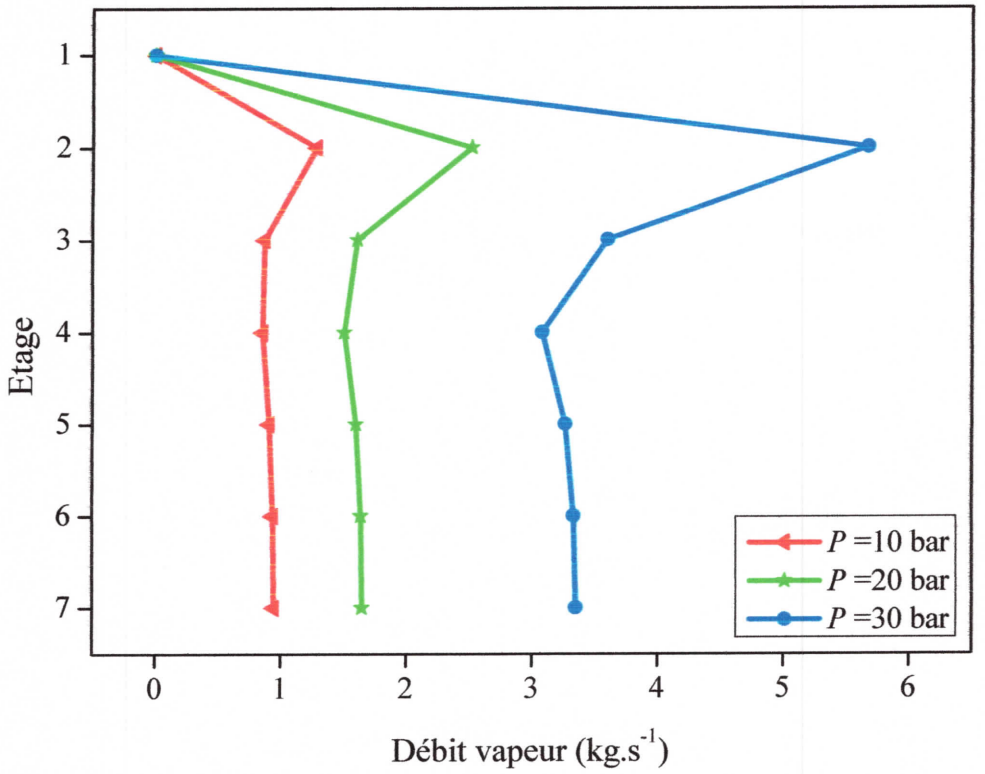


Figure III.6 : Débits vapeurs dans chaque étage sous différents pressions.

On remarque dans la zone d'enrichissement que les débits vapeurs augmententau 2^{éme} étage et diminuent au 3^{éme} étage, puis reste pratiquement constants dans la zone d'épuisement vers le bas de la colonne.

Les courbes présentées dans la figure ont la même allure. Lorsque la pression est égale à 30 bar, les débits vapeur augmentent brusquement jusqu'à la valeur 5.67Kg.s^{-1} au 2^{éme}étage, une augmentation plus grande par rapport à la pression 20bar (2.51Kg.s^{-1}) et la pression 10bar (1.28Kg.s^{-1}).

- **Composition liquide massique**

Les Compositions liquides massiquesdans chaque étage aux pressions de 10bar, 20bar et 30barsont illustrées dans la figure III.7.

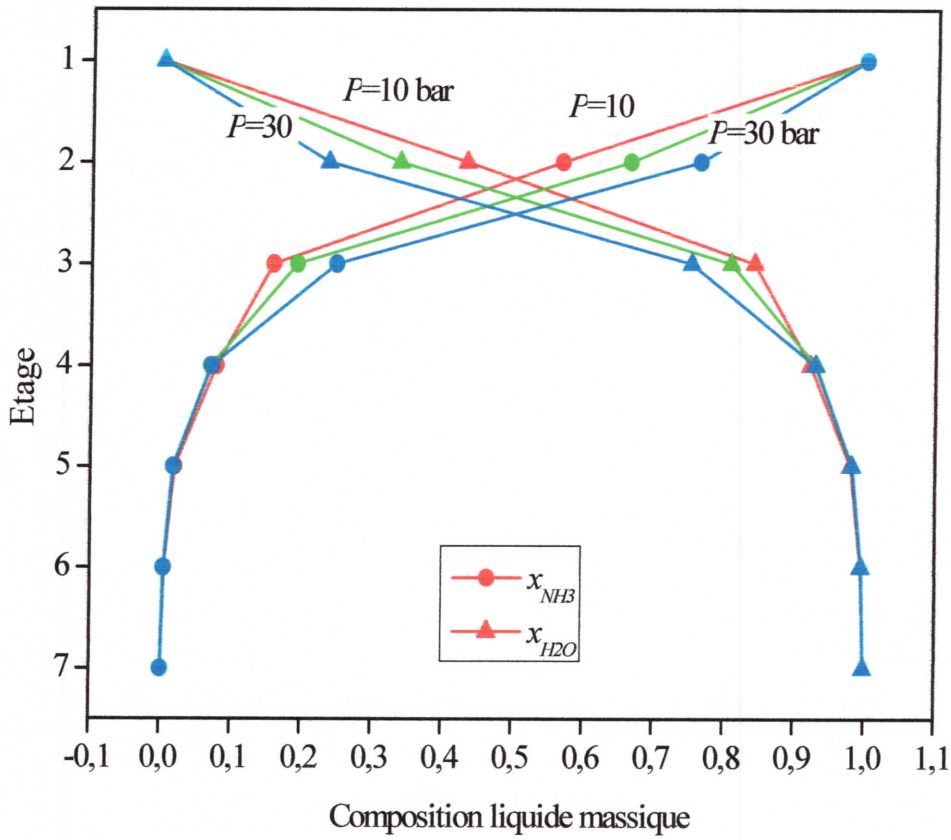


Figure III.7 : Compositions liquides massiques x_{NH3}, x_{H2O} dans chaque étage sous différentes pressions.

On remarque que les compositions liquides massiques de l'eau augmentent progressivement dans la zone d'enrichissement jusqu'à la zone d'alimentations, puis elles deviennent relativement constantes dans la zone d'épuisement. Ceci est très différent du cas de l'ammoniac dans lequel les compositions liquides massiques diminuent progressivement dans la zone d'enrichissement jusqu'au plateau d'alimentation, puis ellesrestent pratiquement constantes dans la zone d'épuisement.

La composition liquide massique de l'eau augment si on diminue la pression, par contre, la composition liquide massique de l'ammoniac diminue si on diminue la pression. Donc la température d'ébullition augmente.Le produit dont la température d'ébullition est la plus faible est évacuéen haut de la colonne (ammoniac), alors que l'eau reste dans la partie basse de la colonne.

- **Profil de température**

La figure III.6 présente les températures dans chaque étage aux pressions de 10bar, 20bar et 30bar.

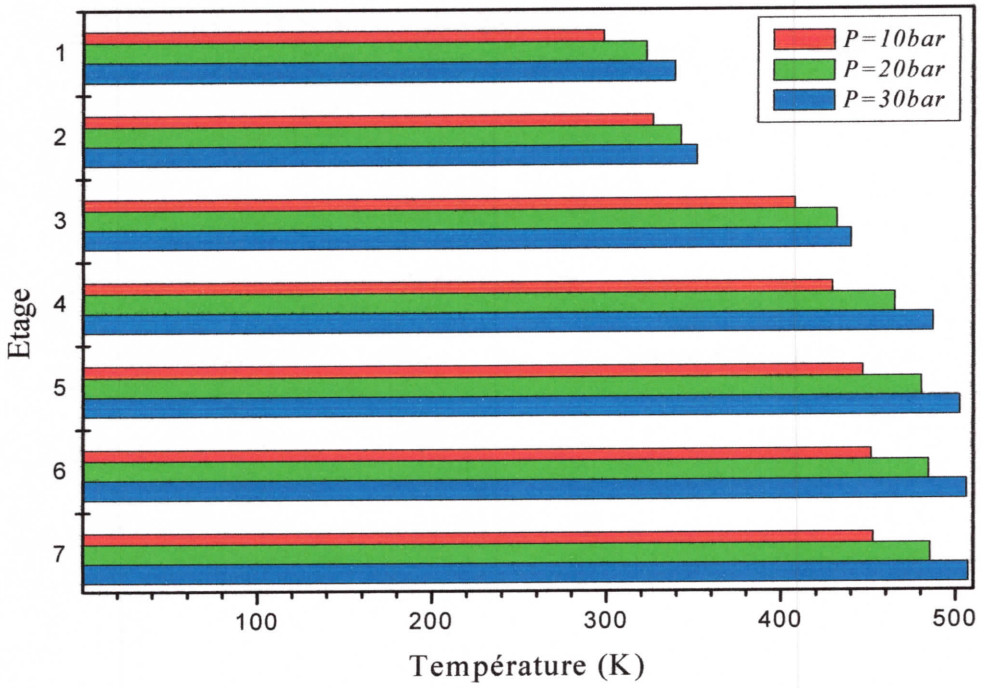


Figure III.8 : Profil de températures dans chaque étage sous différentes pressions.

On voit tout d'abord que le gradient de température est réalisé de bas en haut de la colonne, ensuite les températures sont plus fortes au $5^{éme}$, $6^{éme}$ et $7^{éme}$ étage.
De plus, on remarque que les températures sont plus élevées à la pression 30bar et moins élevéesavec les autres pressions (10 et 20 bar).La température augmente en bas de la colonne lorsqu'elle est plus proche dubouilleur «Un échangeur de chaleur dont le rôle est de porter à ébullition le liquide à distiller», en plus l'augmentation de la pression provoque l'augmentation de la température, la vapeur peut alors être condensée.

- **Production d'entropie**

La figure III.9 présente la production d'entropie dans chaque étage aux pressions de 10bar, 20bar, 30bar.

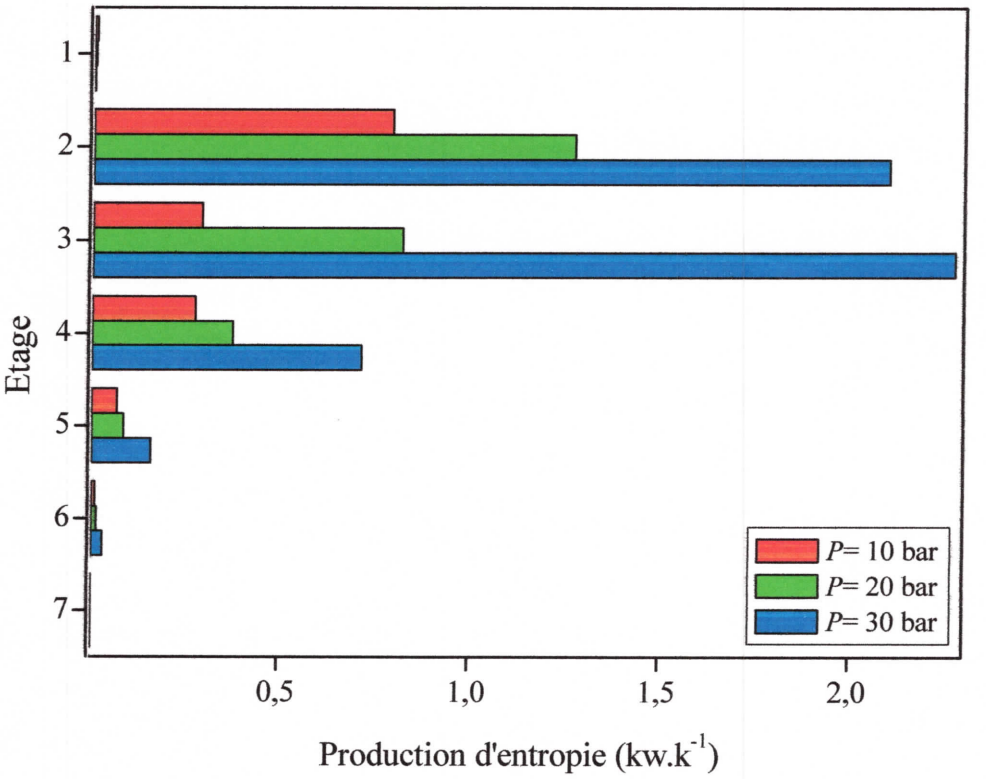


Figure III.9 : Productions d'entropie dans chaque étage sous différentes pressions.

On remarque que la production d'entropie dans la zone d'enrichissement estplus forte au 2^{éme}, 3^{éme} et 4^{éme} étage jusqu'à la zone d'alimentation. Par contre, dans la zone d'épuisement la production d'entropie est plus faible.

- **Construction de Ponchon –Savarit**

La figure III.10 présente la construction de PONCHON-SAVARIT dans une colonne de 7étage à pression de 10 bar. On remarque 7 plateaux théoriques.

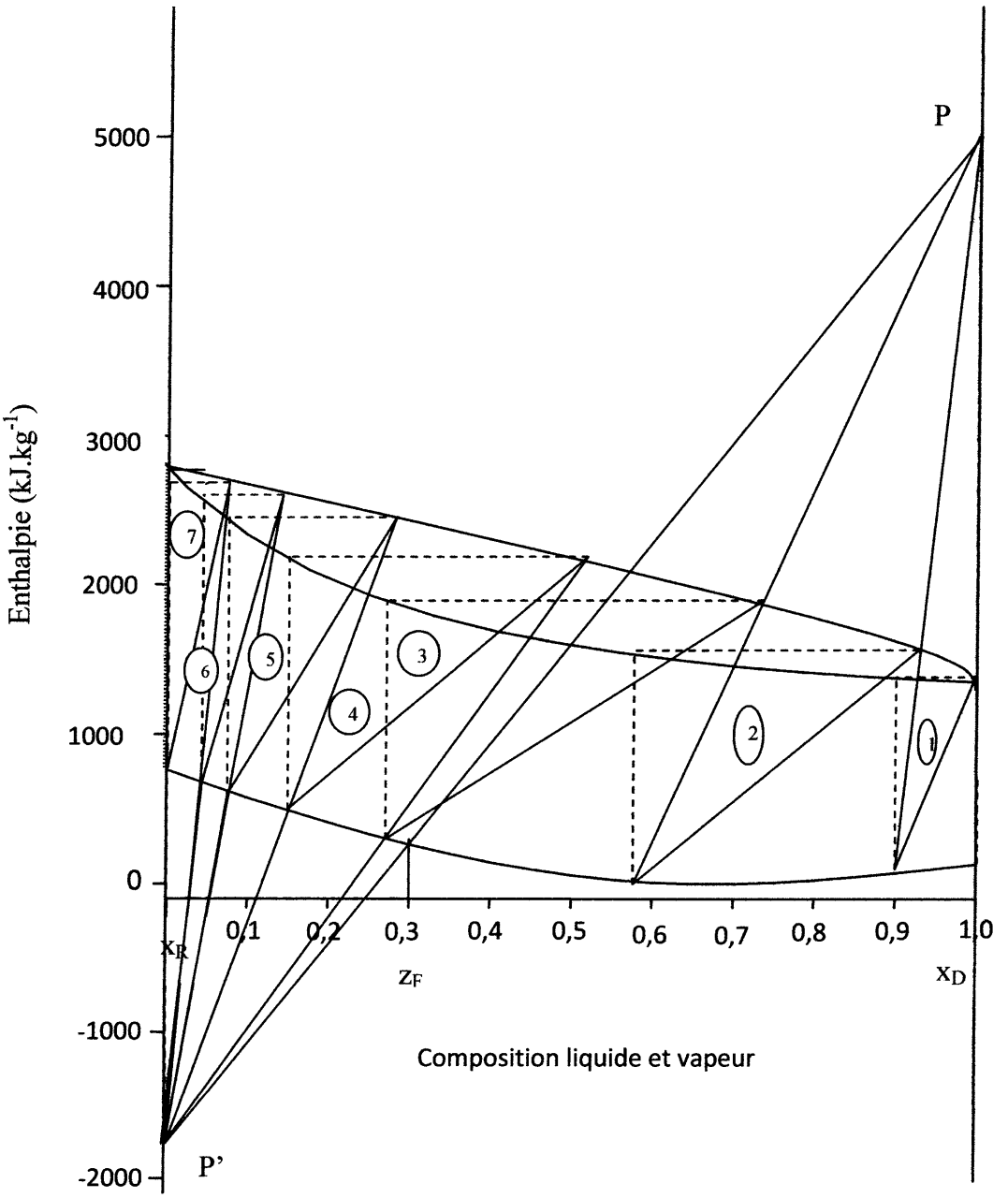


Figure III .10 : construction de ponchon–savarit

III.3.2 Colonne de 9étages

On simule une colonne de distillation de 9 étages aux pressions de 10bar, 20bar et 30bar, ces résultats son présentés sous forme graphique par débit liquide, débit vapeur, composition liquide massique, température et production d'entropie.

- **Débit liquide**

La figure III.10montre les débits liquides dans chaque étage aux pressions de 10bar, 20bar et 30bar.

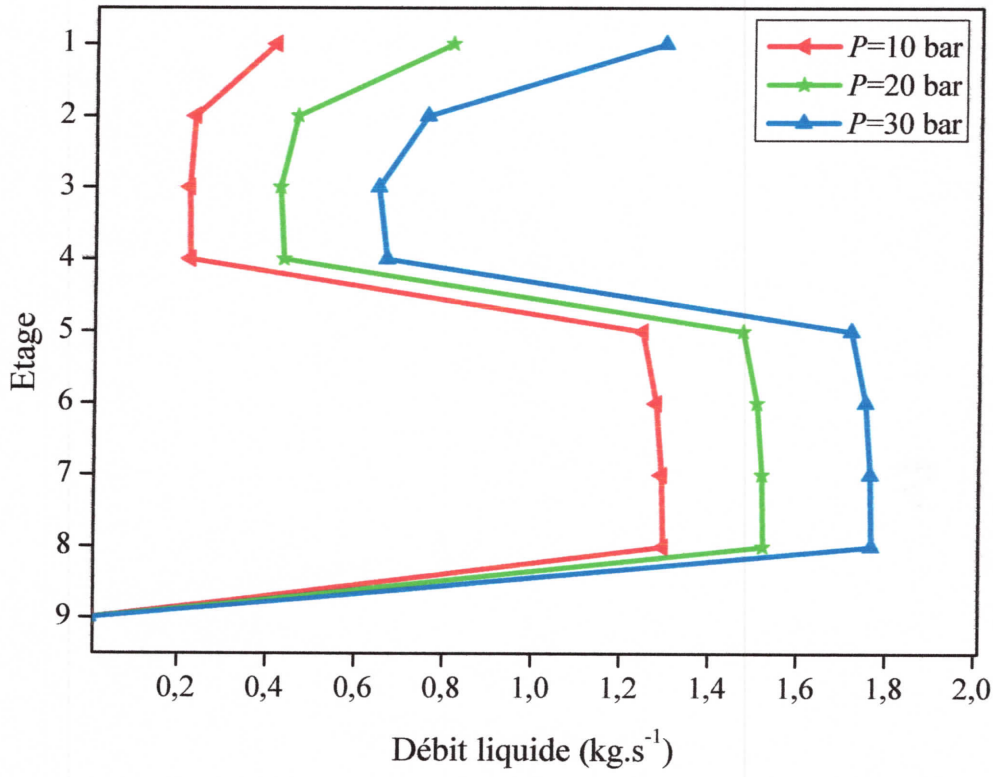


Figure III.11 : Débit liquide dans chaque étage sous différentes pressions.

Les débits liquides dans la section d'enrichissement diminuent progressivement jusqu'au 4^{éme} étage, puis ils augmentent brusquement au plateau d'alimentation, ils deviennent relativement constants dans la section d'épuisement jusqu'au 8^{éme} étage puis diminuent vers la bas de la colonne.Les trois courbesaussi ont la même allure,et le reflux est plus important àla pression 30baroù il se croit vers 1.29Kg.s^{-1} dans le

1^er^étage par rapportà la pression 20bar oùil augmentejusqu'à 0.815Kg.s^{-1}, àla pression 10bar il augmente à une valeur 0.41Kg.s^{-1} au 1er étage.

- **Débit vapeur**

La représentation des débits vapeurs de mélange ammoniac-eau aux pressions 10bar, 20bar et 30bar est donnée dans la figure III.11.

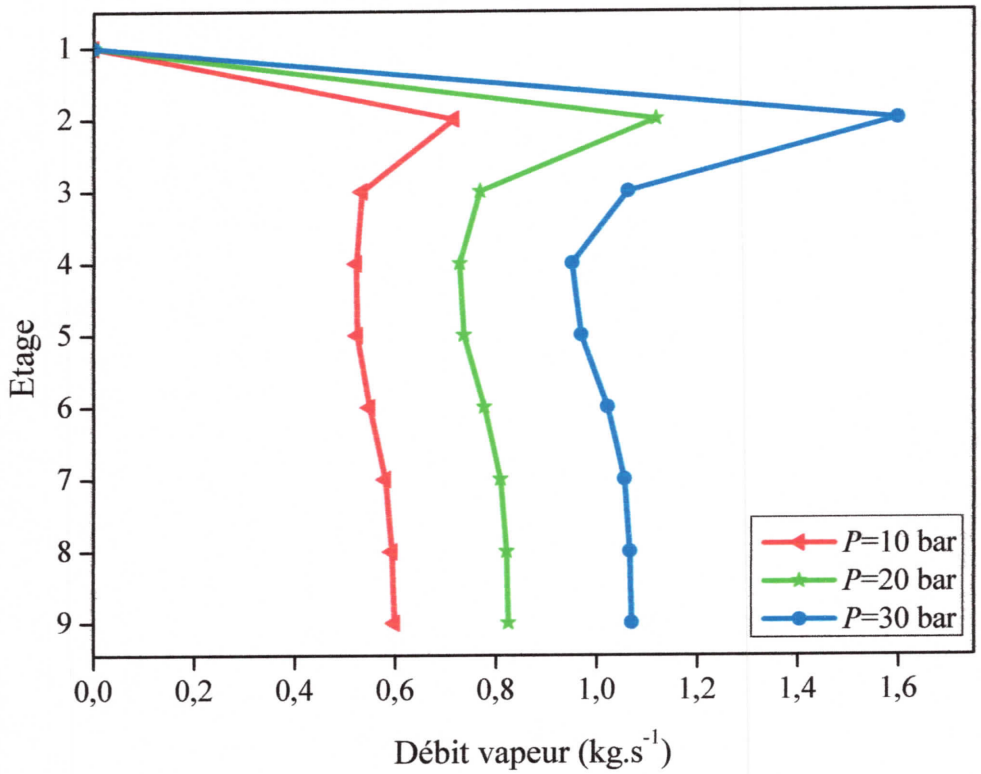


Figure III.12 : Débits vapeur dans chaque étage sous différentes pressions.

D'après la figure ci-dessus les débits vapeur augmentent brusquement au 2ème étage, puis ils deviennent relativement constants au bas de la colonne. De plus, on voit une croissance très rapide du débit vapeur à la pression 30bar, puis ils diminuent progressivement avec la diminution de la pression.

- **Composition liquide massique**

La figure III.12 montre les compositions liquides massiques d'un mélange ammoniac-eau dans chaque étage aux pressions de 10bar, 20bar et 30bar.

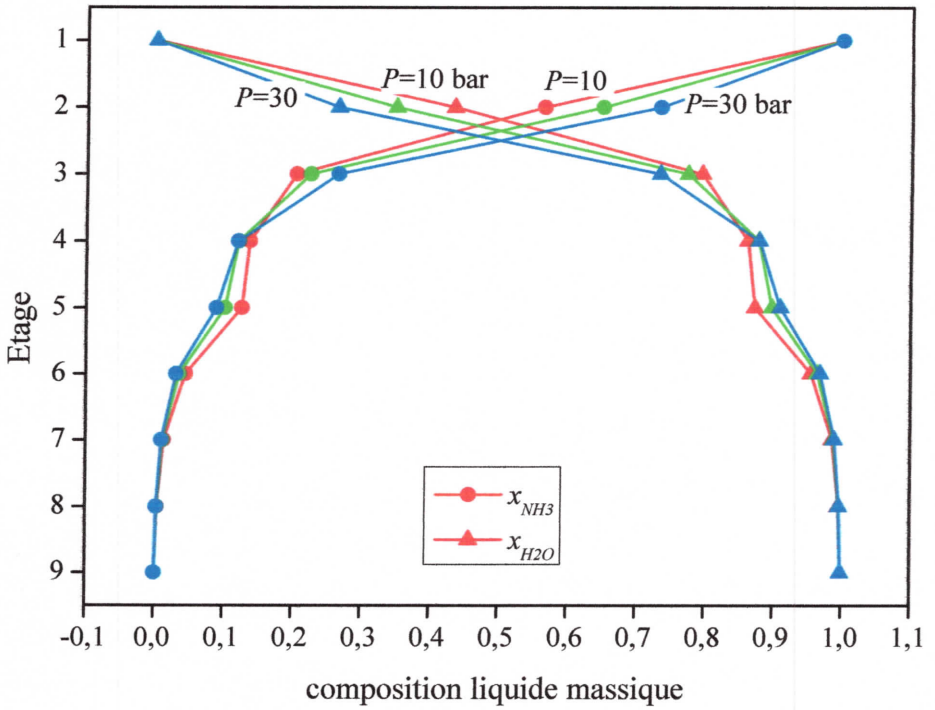


Figure III.13: Composition liquide massique x_{NH3}, x_{H2O}dans chaque étage sous différentes pressions.

La composition liquide de l'eau augmente progressivement dans la zone d'enrichissement jusqu'à la zone d'alimentions, puis elle devient relativement constante dans la zone d'épuisement. Cela est très différent du cas de l'ammoniac dans lequel la composition liquide massique diminue progressivement dans la zone d'enrichissement jusqu'au plateau d'alimentation, puis reste pratiquement constante dans la zone d'épuisement.

On remarque aussi que la composition liquide massique de l'eau augmente sila pression diminue, par contre la composition liquide massique de l'ammoniac diminue si la pressiondiminue. Donc si la pression augmente, la température d'ébullition (T_{eb}) d'un liquide augmente aussi. Cette augmentation permet la séparation des constituants de mélange homogène liquide ammoniac-eauen mettant à profit la différence de volatilité des constituants.

- **Température**

La figure III.13 présente les températures dans une colonne de 9 étages aux pressions de 10bar, 20bar et 30bar.

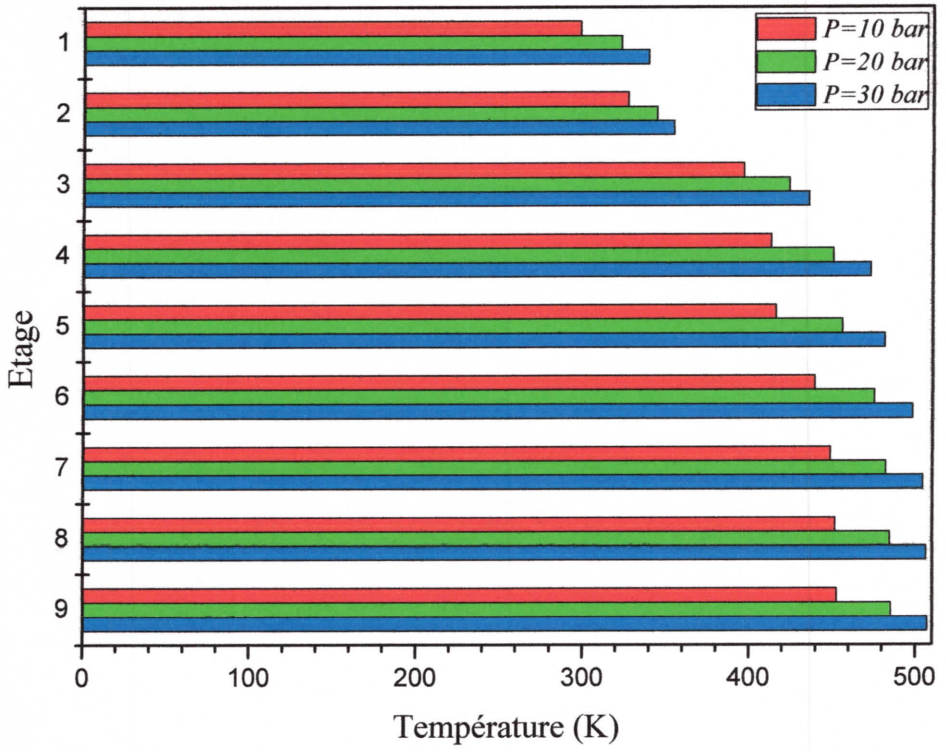


Figure III.14 : Températures dans chaque étage sous différentes pressions.

Le profil des températures est plus élevée dans la section d'épuisement aux $7^{éme}$, $8^{éme}$ et $9^{éme}$ étage.etque la température est plus forte a une pression de 30 bar qui augmente jusqu'à 506 K

Le gradient de température est réalisé de bas en haut lorsqu'on travaille entre sources chaudes qui reçoivent une énergie au niveau du bouilleur qui augmente avec l'augmentation de la pression.

L'augmentation de la température en bas de la colonne est liée à l'augmentation de la composition du constituant le plus lourd. Dans la partie supérieure de la colonne, la diminution de température est due à l'augmentation de la composition du constituant le plus léger.

- **Production d'entropie**

La représentation de la production d'entropie du mélange ammoniac-eau aux pressions 10bar, 20bar et 30bar est illustrée sur la figure III.3.

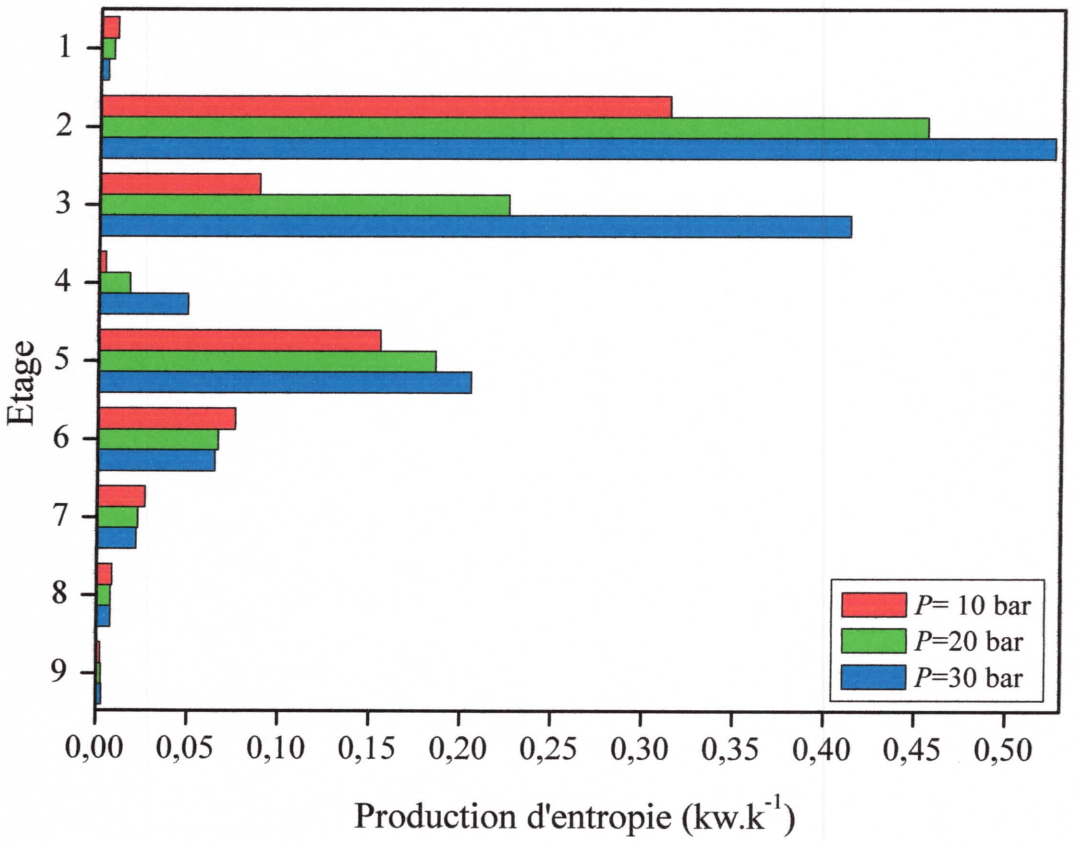


Figure III.15 : Production d'entropie dans chaque étage sous différentes pressions.

La séparation est plus importante dansla section d'enrichissement au 2^{éme}, 3^{éme} et jusqu'au 5^{éme} étage d'alimentation, contrairement à la section d'épuisement, qui génère le plus faible taux de production d'entropie.

On remarque aussi que la production d'entropie augmente dans les étages si on augmente la pression, elle est plus importante à la pression 30bar qui augment jusqu'à la valeur 0.52 $K_W.K^{-1}$ par rapport aux autres pressions 10bar et 20bar.

III.3.3 Colonne de 11 étages

On simule une colonne de distillation de 11 étages aux pressions de 10bar, 20bar et 30bar, ces résultats son présentés sous forme graphique par débit liquide, débit vapeur, composition liquide massique, température et production d'entropie.

- **Débit liquide**

Dans une colonne de 11étage, les débits liquides aux pressions de 10bar, 20bar, 30bar se présentent dans la figure III.15.

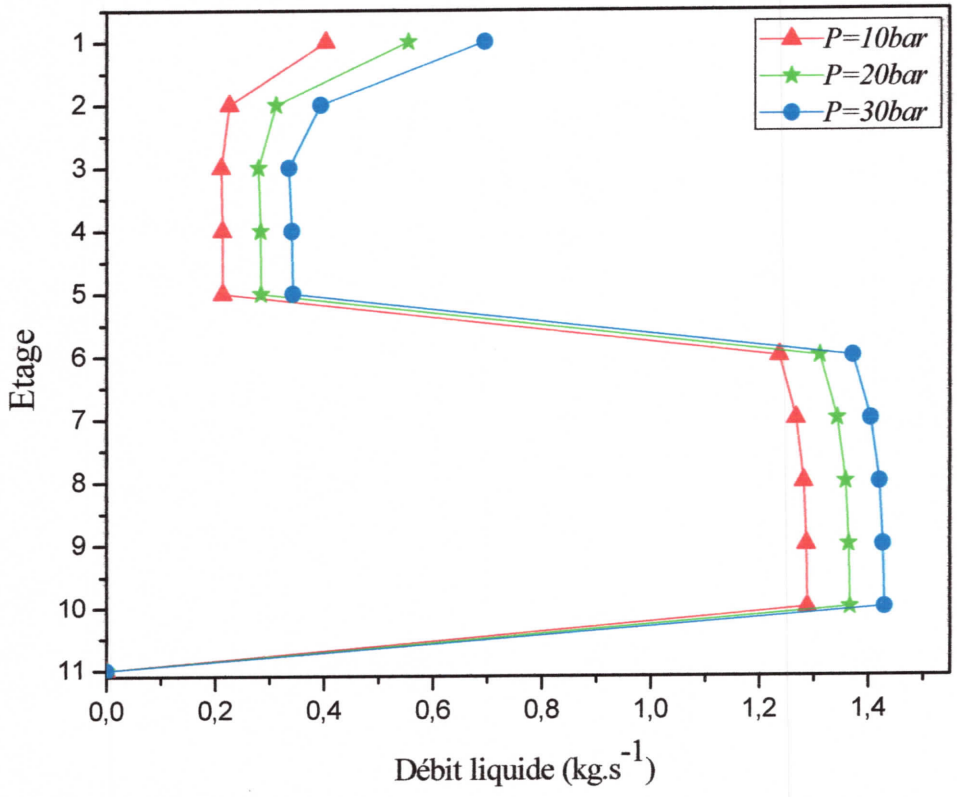


Figure III.16 : Débits liquides dans chaque étage sous différentes pressions.

Les courbes ce forment en lettre S. On remarque que les débits liquides dans la zone d'enrichissement sont en décroissance lorsqu'on est au 2^{éme} étage, puis reste pratiquement constants jusqu'au plateau d'alimentation.

Dans la zone d'épuisement les débits liquides augmentent brusquement au 6^{éme} étage, puis deviennent relativement constants au 10^{éme} étage, et diminuent vers le bas de la colonne.

Si on augmente la pression, les débits liquides augmentent dans chaque étage.

La séparation de l'ammoniac-eau est totale, car le débit liquide de chaque pression est égal à 0 en bas de la colonne.

- **Débit vapeur**

La figure III.16 montre les débits vapeur dans chaque étage aux pressions de 10bar, 20bar et 30bar.

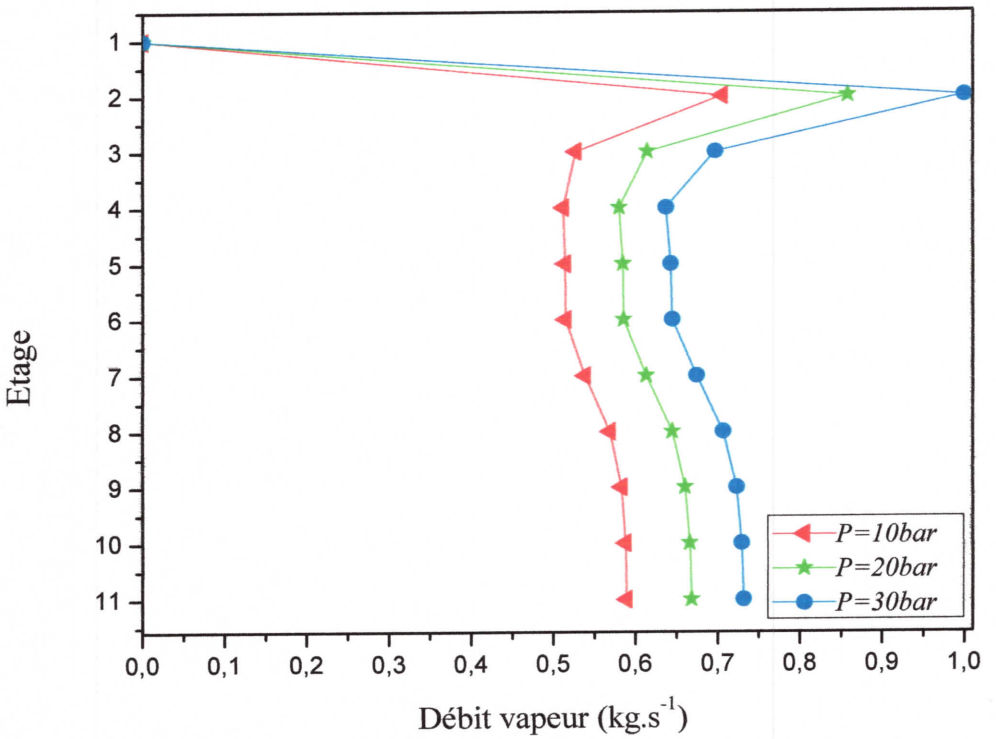


Figure III.17 : Débits vapeur dans chaque étage sous différentes pressions.

Les débits vapeurs augmentent brusquement au 2ème étage, puis deviennent relativement constants au bas de la colonne.

On constate que les courbes présentées dans la figure ont la même allure, sauf que les débits sont légèrement décalés vers les hautes valeurs à pression plus grande. De plus, on voit que la croissance de débits vapeur est très rapide à la pression 30bar, et la croissance diminue progressivement lorsqu'on descend dans la pression.

- **Composition liquide massique**

Les compositions liquides massiques dans une colonne de 11 étages aux pressions de 10bar, 20bar et 30bar sont montrées sur la figure III.17.

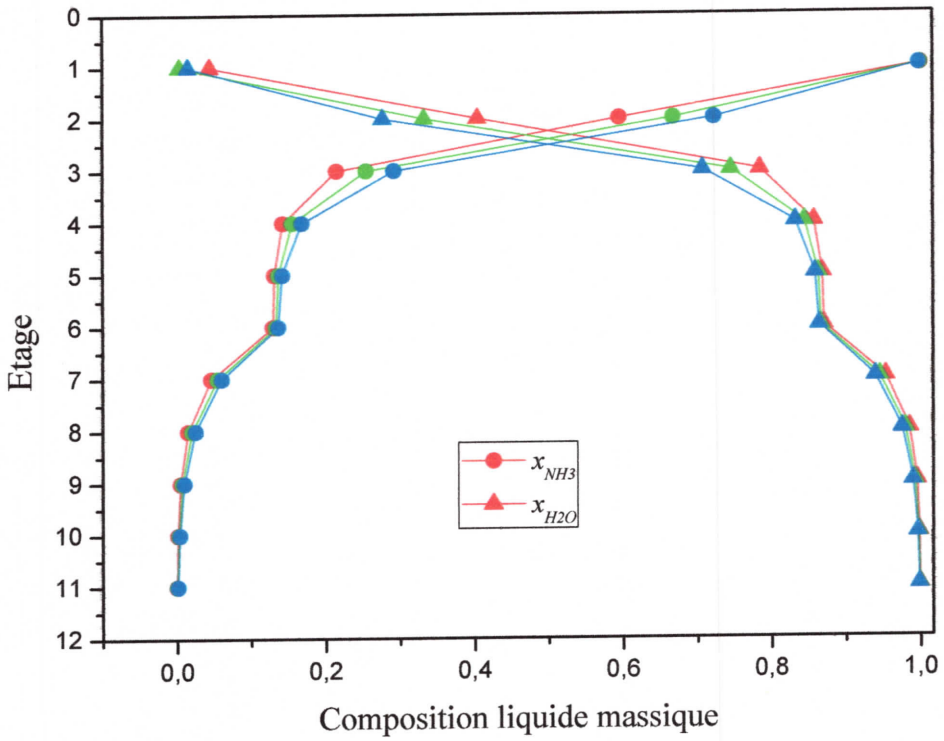


Figure III.18 : Compositions liquides massiques dans chaque étage dans différentes pressions.

À partir de la figure ci-dessus, on remarque que les trois courbes des compositions liquides de l'eau suivent une allure croissante, elles augmentent progressivement dans la zone d'enrichissement jusqu'à la zone d'alimentions, puis elles deviennent relativement constantes dans la zone d'épuisement. Cela est très différent du cas de l'ammoniac suite a une allure décroissante lorsqueles compositions liquides massiques diminuent progressivement dans la zone d'enrichissement jusqu'à au plateau d'alimentation, puis reste pratiquement constant dans la zone d'épuisement.

De plus, on remarque que les compositions liquides massiques de l'eau augmentent si on diminue la pression, par contre les compositions liquides massiques de l'ammoniac diminuent si on diminue la pression.

La température d'ébullition dans la colonne augmente avec l\augmentation de la pression. Le composé le plus volatil « ammoniac » se vaporise en premier à partir du liquide contenu dans la colonne et atteigne un plateau supérieur, et le composé le plus lourd « eau » reste en bas de la colonne.

- **Température**

La figure III.18 présente les températures dans chaque étage aux pressions de 10bar, 20bar et 30bar.

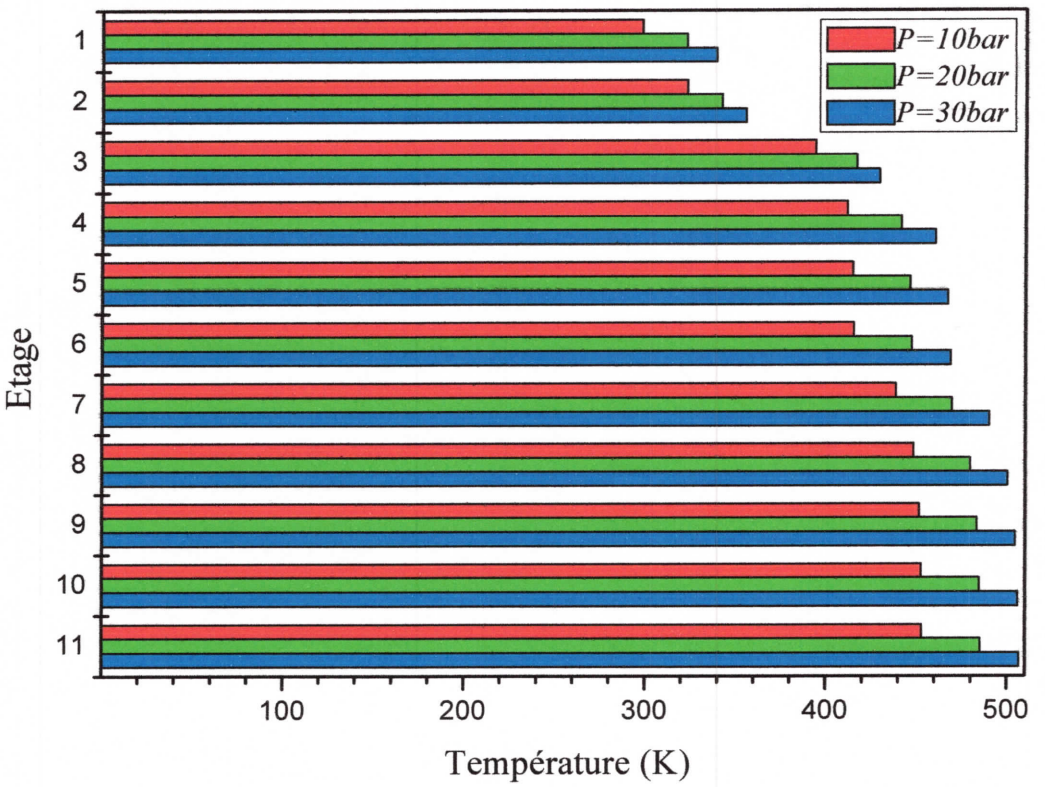


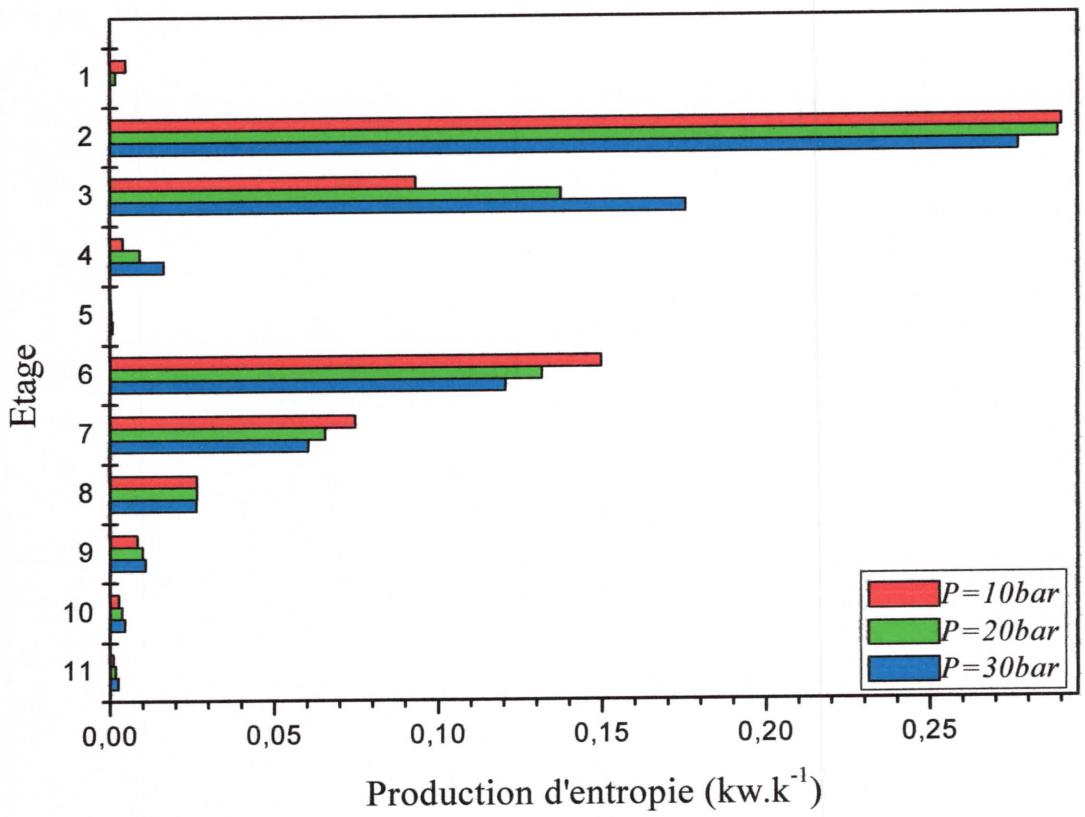
Figure III.19 : Profil de températures dans chaque étage sous différentes pressions.

Les températures sont plus élevéesen bas de la colonne dans la section d'épuisement aux 9^{éme} et 8^{éme} étage, et diminuent lorsqu'on descend dans la colonne.

En remarque que la température est plus forte àla pression 30 bar qui augmente jusqu'à 506.72 K au 11^{éme} étage et diminue proportionnellement avec la pression quivarie entre 485.23 K à pression 20bar et 452.83 K à pression 10bar, cette diminution est plus important quand on monte dans la colonne.

- **Production d'entropie**

La figure III.19 montre la production d'entropie dans chaque étage aux pressions de 10bar, 20bar et 30bar.



FigureIII.20 : Production d'entropie dans chaque étage sous différentes pressions.

La séparation dans la section d'enrichissement est plus importante au 2^{éme}, 3^{éme}et 6^{éme} étage, contrairement à la section d'épuisement qui génère le plus faible taux de production d'entropieau 10^{éme} et 11^{éme} étage.De plus, on remarque que la production d'entropie varie si en change la pression.

III.4 Comparaison de la production d'entropie totale des troiscolonnes

Le tableau ci-dessous illustre les résultats de la production d'entropie totale dans trois colonnes de 7, 9 et 11 étages aux pressions 10bar, 20bar et 30bar.

Table 1: La production d'entropie totale dans trois colonnes de 7, 9 et11étages.

Etage	N=7			N=9			N=11		
Pression	P=10bar	P=20bar	P=30bar	P=10bar	P=20bar	P=30bar	P=10bar	P=20bar	P=30bar
PE (kW /K)	1.4982	2.6143	5.3238	0.6823	0.9886	1.2931	0.6547	0.6763	0.6931

D'après ce tableau, il en ressort que la production d'entropie totale dans le cas de pression 30bar soit plus élevée que dans le cas des pressions 20bar et 10bar, puis on remarque qu'elle s'abaisse entre les trois colonnes avec l'augmentation du nombre d'étages.

Ces résultats vont dans le sens de la théorie de la partition de la production d'entropie énoncée par tondeur qui stipule que la production d'entropie totale est minimale lorsqu'elle est uniformément distribuée dans le système. Ainsi on répartit les irréversibilités et contrôlée pour cela il faut dénombrer (augmentation de nombre d'étage dans la colonne) pour réduire leur ampleur.

La minimisation de la création d'entropie toute en maximisant le rendement énergétique, mais aussi d'un facteur économique, car le coût de procède diminue en plus diminué son influence sur l'environnement.

CONCLUSION GÉNÉRALE

Conclusion générale

Cette étude s'inscrit dans le cadre général de la simulation qui ce spécifie au calcul d'une colonne de distillation séparant le mélange binaire non idéal ammoniac-eau, la comparaison entre les paramètres internes de fonctionnement de la colonne « le débit vapeur, le débit liquide et la température », la production d'entropie en fonction de pression et du nombre d'étages basés sur des équations d'équilibre liquide-vapeur et les bilans de matière dans les deux sections de la colonne et l'analyse des irréversibilités thermodynamiques pour évaluée l'efficacité de la colonne par le calcul de production d'entropie.

Le mélange ammoniac-eau est un mélange non idéal et difficile à séparer, pour cela, on c'est basé sur la méthode de la simulation de la colonne de distillation « qui est l'utilisation d'un modèle mathématique pour générer le comportement d'un procédé » en utilisant le logiciel de simulation Fortron77 dont l'exécution a été simple et rapide, et en se basant sur la méthode de la matrice tri diagonal modifiée pour pouvoir imposé la séparation, on a pu maitriser les paramètres internes pour comparer entre les trois colonnes dont le nombre d'étage est 7, 9 et 11. Ce ci nous a amenés à tracer les diagrammes d'équilibre « isobare, isotherme, Composition de la vapeur en fonction de celle du liquide et enthalpique » en plus trace les diagrammes des débits liquide, débits vapeur, composition liquide massique, températures, production d'entropie, ponchon-savarit et obtenir les résultats souhaités.

Ces résultats obtenus montrent que :

- Dans chaque colonne, la production d'entropie augmente avec l'augmentation de la pression,
- Entre les trois colonnes, la production d'entropie diminue avec l'augmentation du nombre d'étages. Ce qui amène à la baisse des irréversibilités thermodynamiques, le rendement énergétique, et la consommation d'énergie dont son impact sur l'environnement est réduit.

Comme nous venons de le voir, la distillation classique est une opération de séparation qui consomme beaucoup d'énergie. Ce ci permet d'aboutir à de nouvelles procédé de distillation qui consiste à ajouter des échangeurs intégrés dans la colonne même. Ce nouveau procédé, dit la distillation diabatique ou quasi-réversible constitue une importante amélioration par rapport à la distillation classique sur le plan énergétique.

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

Références bibliographiques

[1] Wanquier .JP. le raffinage du pétrole, Tome(2), procède de séparation, Techniq, Paris, 1998.

[2]Cours de raffinage de 'IFP.

[3] Kane Abdoulaye, Conception et Caractérisation d'un microcontaceur à film tombant concept de distillation microstructurée, Thèse de Doctorat, Institut National Polytechnique de Lorraine, 2010.

[4] Emilian Koller,'Aide-mémoire Génie Chimique',3e édition L'usinenouvelle DUNOD, DUNOD, Paris, 2001, 2005,2009.

[5]WuithierP. Raffinage et génie chimique.2éme ed. Technip, Parise, 1972.

[6]LietoJ.Le génie chimique à l'usage des chimistes.1ére ed.Tec et Doc, Paris, 1998.

[7]MoulinJ.P al. Distillation compartimentée idéale .In : Traité du Génie des procédés (Technique de l'ingénieur), Paris, J1072, 2001..

[8]Thierry Cachot. La Distillation Diabatique Expérimentation et Application Industrielle, Thèse de Doctorat, Institut National Poly Technique de Lorraine, 1992.

[9] Flower J., Linnhof B. Thermodynamic analysis in the design of process networtks. Comp. Chem. Eng., 3, 283-291, 1979.

[10] Annamalai K., Puri I. Advanced thermodynamics engineering. CRC Press LLC, USA, 2002.

[11] Berry R.S., Salamon P. On a relation between economic and thermodynamic optima. Res & Ener., 1, 125-137, 1978.

[12] Cicile J.C. Distillation.Absorption-Etude pratique. In : Traité Génie des procédés (Technique de l'ingénieur), Paris, J2610, 2001.

[13] Halvorsen I.J. Minimum energy requirements in complex distillatio arrangements. Thèse de Doctorat, Institut National Polytechnique. Université des sciences et de Technologie de la Norvège, 2001.

[14]John M. Prausnitz, Calcul sur ordinateur des équilibres liquid –vapeur et liquid-liquide, Paris, 1971.

[15] Ziegler B., Trepp Ch. Equation of state for ammonia-water mixtures. Int J Refrig., 7(2), 101-106, 1984.

[16]Bachmann P. Précis de génie chimique .Georg Editeur, Genève, 1981.

[17] Akpa,Jackson Gunorubon and Umuze Omonigho Dieperye, Simulation of a Multi Component Crude Distillation Column,Rivers State University of Science and Technology Port-Harcourt,Rwers State, Nigeria.

[18]Abdelkader Hadj Seyd1, Touhami Lanez2, and Boufatah Babaia, Development of simulation software of the number of theoretical platesin a con tinuous distillation column. Universite de Ghardaia International Journal of Innovation and Applied Studies, 2014.

[19] Bernard Grandjean, Distillation et Extraction, Notes de cours ,2013 .

[20] J.C. Wang and G.E. Henke, 'Tridiagonal Matrix for Distillation', Hyd. Procs, Vol. 45, N°8, pp. 155 – 163, 1966.

[21] C.DERNANE, réduction des irréversibilités lors de la séparation par distillation, mémoire de magister, université de Sétif ,2008.