

Introduction au logiciel de simulation ASPEN

Les principales caractéristiques d'ASPEN (pour Advanced System for Process Engineering) sont :

- Grand ensemble d'opérations unitaires
- Nombreux modèles de calcul des propriétés physiques
- Systèmes de régression de données et de génération de tables de propriétés physiques
- Méthodes de contributions de groupes permettant de suppléer au manque de données expérimentales pour l'estimation des propriétés physiques
- Caractérisation des fractions pétrolières
- Système intégré de traitement des électrolytes
- Capacité à traiter les solides
- Possibilité d'inclure des modèles de l'utilisateur (de propriétés physiques et d'opérations unitaires)
- Séquencement et convergence automatique des schémas de procédé (ASPEN est bâti sur l'architecture séquentielle-modulaire)
- Possibilité de définir des spécifications de design
- Possibilité d'optimisation paramétrique
- Choix entre plusieurs algorithmes de convergence pour les recyclages, les spécifications de design et l'optimisation
- Évaluation des coûts et de la rentabilité (ce qui inclut des calculs de dimensionnement des appareils)
- Interface graphique assez simple d'emploi

ASPEN-Plus peut être utilisé pour modéliser des procédés de :

- Chimie organique et minérale, de la grande synthèse à la chimie fine
- Pétrochimie
- Liquéfaction du charbon
- Gazéification du charbon
- Traitement des roches bitumineuses
- Pulpes et papiers
- Agro-alimentaire
- Traitement des minéraux
- Biotechnologie

1. Propriétés du logiciel

a) Opérations unitaires et courants

Aspen est construit autour d'une architecture séquentielle-modulaire. Une opération unitaire est représentée par un sous-programme auquel on fournit les variables des débits d'entrée et les paramètres de fonctionnement, et qui renvoie les variables des débits de sortie.

Un débit est représenté par un vecteur contenant :

- Les débits partiels de chaque constituant
- La pression, la température
- L'enthalpie massique, la fraction de vapeur, celle de liquide, l'entropie massique et la densité.

Il est possible de décomposer un débit en sous-débits, ayant chacun cette structure générale. Les sous-débits peuvent être du type MIXED (mélange de liquide, vapeur et solide), CISOLID (solide conventionnel inerte vis à vis des équilibres entre phases) ou NC (solide non conventionnel, c'est à dire auquel on ne peut pas attribuer de formule chimique précise).

b) Calcul des recyclages

Dans une approche séquentielle-modulaire, les recyclages sont convergés itérativement : on définit un courant "coupé", et on établit un processus de convergence sur les variables de ce courant coupé, en calculant de façon itérative les opérations de la boucle de recyclage.

A partir d'une description de la structure du procédé (schéma de connexion des opérations unitaires) le logiciel détermine automatiquement les boucles de recyclage, choisit les courants à couper pour permettre la convergence, et détermine la séquence de calcul des opérations unitaires. Il est néanmoins possible pour l'utilisateur de choisir d'autres courants coupés que ceux proposés par le logiciel, ce qui est très utile lorsque l'on sait en initialiser les valeurs.

c) Système de propriétés physiques

Les propriétés physiques (thermodynamiques et propriétés de transport) sont nécessaires au cours d'une simulation pour le calcul des opérations unitaires (équilibres liquide-vapeur et enthalpies), et pour le dimensionnement (viscosité, conductivité thermique, ...)

Un système de calcul de ces propriétés physiques donne ces propriétés comme fonctions des variables d'état (température, pression, composition), à partir de modèles d'origine empirique ou moléculaire, en utilisant des paramètres stockés dans des banques de données (coordonnées critiques, paramètres de corrélation (Antoine),...). ASPEN fournit un grand nombre de "méthodes" de calculs pour ces propriétés physiques, collections de routines de calcul des propriétés physiques qui sont directement utilisées par les modèles d'opérations unitaires.

Le choix raisonné des modèles et corrélations adaptées au calcul des propriétés thermodynamiques et de transport pour un type de mélange donné est souvent un domaine de spécialiste.

2. Les principales opérations unitaires

2.1 Alimentations, produits

Ce ne sont pas à proprement parler des opérations unitaires, mais les connexions avec l'extérieur du procédé sont classées dans la rubrique "Feed-Prod" des modèles d'opérations. Il faut simplement faire attention au choix de l'icône, qui permet de distinguer entre des débits matériels (cas le plus fréquent) et des débits de chaleur ou de travail.

2.2 Mélangeurs, diviseurs de débit

a) Mélangeurs (MIXER)

Un mélangeur (Mixer) accepte un nombre illimité de débits d'entrée et les combine en un débit de sortie unique. L'état du mélange est obtenu à partir d'un calcul d'équilibre isenthalpique (le mélangeur est supposé adiabatique). La pression de sortie du mélange est, par défaut, la plus petite des pressions des débits d'entrée. On peut indiquer une perte de charge par rapport à cette pression sous la forme d'une pression négative ou nulle.

b) Diviseurs de débits (FSPLIT)

Un diviseur de débit a un débit d'entrée et un nombre illimité de débits de sortie, tous de même température, pression et composition. On doit préciser, pour chaque débit de sortie sauf un, soit son débit total (molaire ou massique), ou, ce qui est souvent plus pratique, sa fraction par rapport au débit d'entrée.

c) Les séparateurs formels

Les modèles SEP et SEP2 ne sont pas associés à des opérations unitaires réelles, mais ils permettent de séparer un débit d'entrée en plusieurs débits de composition différente. On spécifie pour chaque débit la température et la pression, et, pour chaque constituant, le taux de récupération dans les débits de sortie (sauf un). Ces modèles peuvent être utilisés en cours de développement pour remplacer temporairement des opérations de séparations réelles qu'on ne souhaite pas modéliser complètement.

2.3 Flashes et échangeurs

a) Les flashes

Un flash est un équilibre entre phases fluides. Il en existe deux modèles : FLASH2 pour les équilibres liquide-vapeur, et FLASH3 pour les équilibres liquide-liquide-vapeur. Conformément à la règle de la variance pour un mélange de composition globale déterminée, il suffit de spécifier deux grandeurs, parmi pression, température, fraction vaporisée ou énergie reçue (DUTY). Pour FLASH3, on peut aussi indiquer comment distinguer les deux phases liquides en spécifiant pour la deuxième un constituant clé : la phase la plus riche en ce constituant sera le liquide 2.

b) Le HEATER

Un HEATER peut représenter n'importe quelle opération qui échange de la chaleur avec l'extérieur. Il peut y avoir un nombre quelconque de débits d'alimentation, mais une seule sortie (à la différence des flashes). Les spécifications sont les mêmes que pour un flash. Le modèle HEATER se contente de calculer les bilans matière et énergie, indépendamment de la façon dont l'énergie est échangée avec l'extérieur. Dans le schéma de production de cyclohexane, par exemple, le bloc MEL-IN est un HEATER, spécifié par une température et une pression de sortie, qui calcule simplement l'énergie à fournir. Physiquement, cela peut être une chaudière ou un échangeur de chaleur.

c) Les échangeurs de chaleur

HEATX et MHEATX sont des modèles de calcul d'échangeurs ou de réseaux d'échangeurs de chaleur. Par rapport au HEATER, ils permettent de tenir compte des surfaces et coefficients d'échange thermique. Il est souvent avantageux de modéliser un échangeur de chaleur entre deux débits du procédé par deux HEATERS couplés par un débit de chaleur (cf 8.1). Le dimensionnement peut ensuite être fait par le programme d'estimation des coûts.

2.4 Les colonnes de distillation

Il existe un grand nombre de modèles de calcul de distillation. Nous en utiliserons essentiellement deux : DSTWU pour le design de colonnes simples, RAD-FRAC pour le calcul rigoureux des colonnes.

a) DSTWU

Il s'agit d'un modèle de calcul approché de colonne simple (une charge unique, pas de soutirage latéral), basé en particulier sur les équations de Gilliland et Underwood. Le modèle est capable de calculer le taux de reflux minimal, et de trouver, pour des performances de séparation imposées entre deux constituants clés, le nombre d'étages correspondant à un taux de reflux donné, ou le taux de reflux correspondant à un nombre d'étages. On spécifie donc :

- Les performances de séparation : on définit une clé lourde et une clé légère parmi les constituants (ce sont les composants entre lesquels la colonne doit "couper") et pour chacun des constituants clés, leur taux de récupération *dans le distillât* (en général, proche de 1 pour la clé légère et de 0 pour la clé lourde)
- Soit le nombre d'étages, soit le taux de reflux. Il est possible de spécifier le taux de reflux sous la forme d'un multiple du taux de reflux minimum, en indiquant une valeur négative : un taux de reflux de -1,3 sera interprété comme $1,3 \cdot r_{f,min}$.
- La pression en tête et en pied de colonne
- Par défaut, le condenseur est supposé total. Un condenseur partiel peut être modélisé en indiquant une valeur non nulle pour RDV (taux de vapeur dans le distillat).

b) RADFRAC

C'est probablement le modèle le plus riche en possibilités du logiciel. RADFRAC permet de modéliser de façon rigoureuse des colonnes de distillation, d'absorption, d'entraînement à la vapeur, de tenir compte de démixtions liquides ou de réactions chimiques sur les plateaux, de faire des calculs de dimensionnement, etc...

Ce qu'il faut toujours spécifier :

- Dans l'onglet "*Radfrac/Configuration*", le nombre d'étages et deux spécifications supplémentaires entre taux de reflux, débit de distillat ou de résidu, puissance thermique au bouilleur ou au condenseur. Cela correspond aux 3 degrés de liberté de la distillation.
- Dans l'onglet "*Radfrac/Streams*", la position des alimentations et des soutirages (les étages sont comptés à partir du condenseur)
- Dans l'onglet Pressure, le profil de pression dans la colonne. On peut n'indiquer que la pression au condenseur si la colonne est supposée isobare ou indiquer la pression à quelques plateaux (avec interpolation et extrapolation linéaire).

2.5 Les réacteurs

Les modèles de réacteurs les plus importants sont :

- Le réacteur stœchiométrique (RSTOIC) : c'est un modèle très élémentaire, à qui on indique les réactions qui ont lieu (c'est à l'utilisateur de les équilibrer !) et un taux de conversion pour chacune de ces réactions
- Le réacteur à l'équilibre. Le modèle le plus élaboré est RGIBBS, qui minimise l'enthalpie libre du mélange par rapport à la composition du mélange (sous contrainte de respecter les bilans en atomes) au nombre de phases et à leur composition. Les propriétés d'état standard de chaque molécule pouvant sortir du réacteur (par défaut, toutes les molécules définies dans la simulation) sont utilisées, ce qui évite de devoir introduire les réactions et leur constante d'équilibre
- Les modèles de réacteurs basés sur la cinétique : RCSTR (réacteur parfaitement agité), RPLUG (réacteur piston) et RBATCH (réacteur fermé ou semi fermé).

2.6 Pompes et compresseurs

Pour une pompe, on spécifie soit la pression de sortie, soit la puissance. Pour un compresseur, on indique en plus le mode de calcul (isentropique, polytropique). On peut aussi fournir le rendement (isentropique ou polytropique).