



HYSYS® : une introduction à la simulation en génie chimique

 **aspentech**



Dr. Mokhtar Adel
Université de Relizane



Chapter 1. Starting with HYSYS

Chapter 2. Equations of State

Chapter 3. Pump

Compressor

Expander

Heat Exchanger

Flash Separator

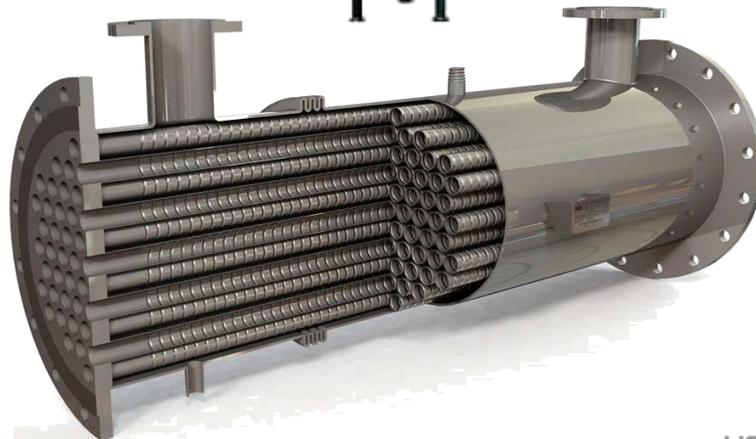
Conversion Reaction

Equilibrium Reaction

Absorber

Separation Columns

Examples



Définition de la simulation

La simulation est définie comme étant la représentation d'un phénomène physique à l'aide de modèles mathématiques simples permettant de décrire son comportement. Autrement dit, la simulation permet de représenter par des modèles mathématiques les différents phénomènes de transfert de masse, d'énergie et de quantité de mouvement qui se produisent dans les différentes opérations unitaires.

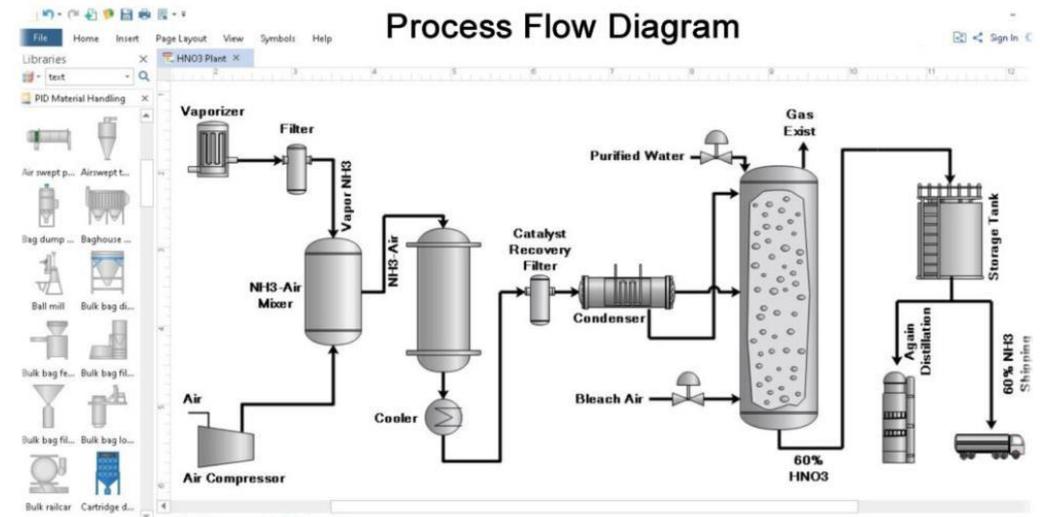
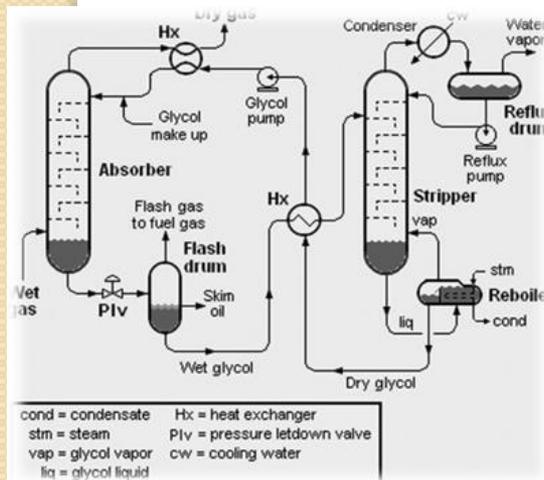
Principes de fonctionnement et rôle des simulateurs

Tout simulateur industriel de procédés chimiques est organisé autour du module suivant :

- Une base de données des corps purs et un ensemble de méthodes pour estimer les propriétés des mélanges appelés aussi modèles thermodynamiques.
- Un schéma de procédé permettant de décrire les liaisons entre les différentes opérations unitaires constituant l'unité (PFD pour Process Flow Diagram).
- Des modules de calcul des différentes opérations unitaires contenant les équations relatives à leur fonctionnement : réacteur chimique, colonne de distillation, colonne de séparation, échangeurs de chaleur, pertes de charges, etc.
- Un ensemble de méthodes numériques de résolution des équations des modèles.
- Avec ce type de logiciel, les ingénieurs peuvent à partir de la donnée des corps purs présents dans le procédé et du schéma de procédé, développer un modèle du processus reposant sur la mise en commun des équations décrivant les différentes opérations unitaires, les réactions chimiques, les propriétés des substances et des mélanges, qui puisse aussi communiquer avec d'autres applications comme Excel, Visual Basic et Matlab,...

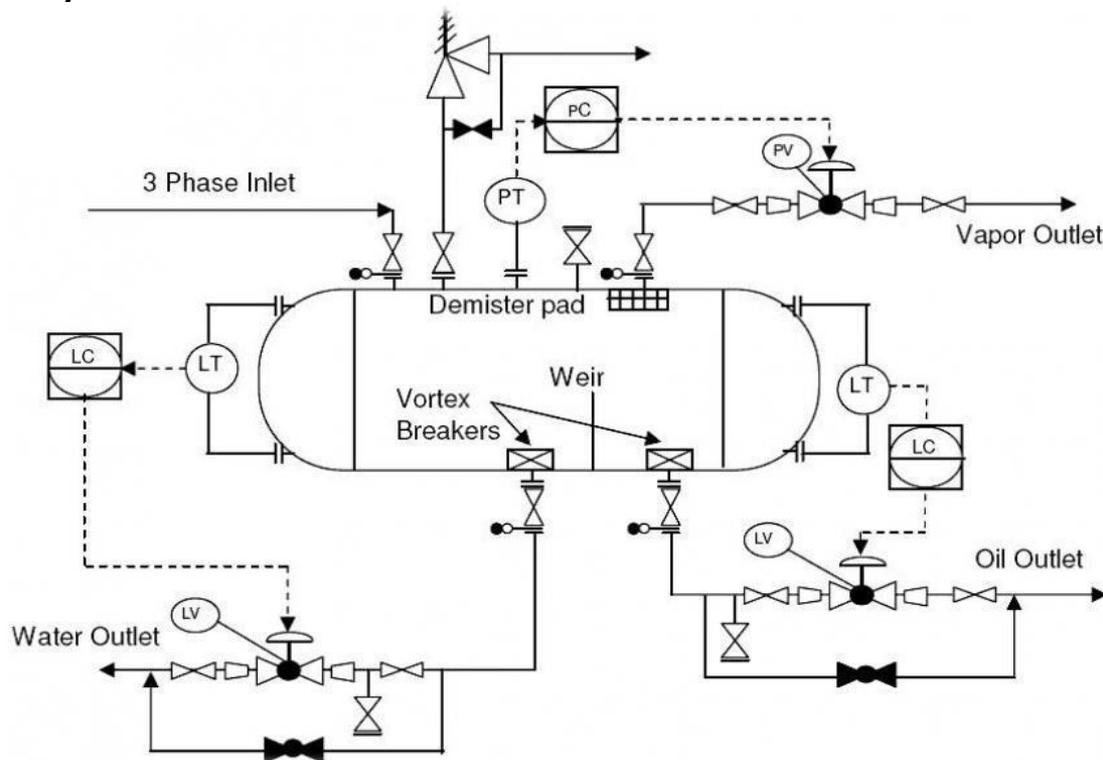
Process flow diagram (PFD)

Un diagramme de flux (débit) de processus (PFD) est une représentation graphique d'un processus de génie chimique qui montre le chemin principal du flux de processus. Il ne montre pas les détails mineurs du processus, mais se concentre plutôt sur l'équipement utilisé, les vannes de régulation et les autres instruments présents. Il permet d'illustrer comment les principaux composants d'une usine de traitement interagissent les uns avec les autres pour produire l'effet souhaité. Il est également utilisé efficacement dans d'autres secteurs tels que l'administration des affaires pour comprendre comment différentes sections d'une entreprise peuvent travailler efficacement afin d'atteindre leurs objectifs spécifiques. Frank Gilbreth Sr. a été la première personne à développer un organigramme en 1921, lorsqu'il l'a présenté à l'American Society of Mechanical Engineers (ASME).



Les P&ID (Piping and Instrumentation Diagram)

Un schéma tuyauterie et instrumentation (en anglais Piping and instrumentation diagram ou Process and instrumentation diagram, abrégé P&ID) est un diagramme qui définit tous les éléments d'un procédé industriel. Il est le schéma le plus précis et le plus complet utilisé par les ingénieurs pour la description d'un procédé. Il se distingue du schéma de procédé par l'ajout des éléments de contrôle, les armatures, les détails sur l'isolation et la position coordonnées des installations les unes par rapport aux autres. Les installations ainsi que les vannes et les éléments de contrôle sont décrits par des symboles.



Modes de fonctionnement des simulateurs

Il y a deux modes de fonctionnement dans un simulateur : statique (ou stationnaire) et dynamique. Les simulateurs statiques résolvent des équations statiques qui traduisent le fonctionnement en régime permanent (à l'équilibre), tandis que les simulateurs dynamiques permettent d'évaluer l'évolution des variables dans le temps à partir de la résolution de systèmes d'équations différentielles. Les simulateurs industriels sur la thermodynamique les plus connus mondialement sont :

- Statiques : ASPEN PLUS (Aspen Technologies), Design II de (WinSim), HYSYS (Hyprotech), PRO/II (Simulation Sciences), PROSIM
- Dynamiques : HYSYS (Hyprotech), ASPEN DYNAMICS (Aspen Technologies), Design II de (WinSim), DYMSYM (Simulation Sciences Inc.)

Modélisation mathématique

Un modèle mathématique est composé d'une série d'équations développées dans l'objectif de décrire le comportement d'un système donné (opération unitaire : séparation de phases, fractionnement de composants, compression, détente, échange de chaleur ou autre). Ce sont des équations de conservation de masse, d'énergie et de quantité de mouvement. Ces équations peuvent être algébriques ou différentielles.

Utilisation du simulateur

Le simulateur peut être utilisé lors de la conception d'un procédé industriel afin de :

- Etablir des bilans de matière et d'énergie d'un procédé industriel.
- Dimensionner les équipements de ce procédé.
- Ou bien dans le suivi des procédés qui sont déjà installés afin de :
- Réajuster les paramètres de fonctionnement dans le cas de changement de compositions de l'alimentation ou des conditions de fonctionnement de certains équipements.
- Déterminer les performances des équipements.

Types de modèles

1. Équations différentielles représentant les bilans de matière, d'énergie et de quantité de mouvement
2. Empiriques (coefficients de transfert de chaleur et de matière, facteurs de friction, la plupart des modèles thermodynamiques, etc.)

Modèle et simulation

Lorsque le système réel que l'on souhaite observer devient trop complexe et que de nombreuses variables sont en jeu, la modélisation intervient pour prendre en charge et traiter les problèmes : un modèle est élaboré pour essayer de rendre compte de la complexité du système tout en essayant de réduire le nombre de paramètres.

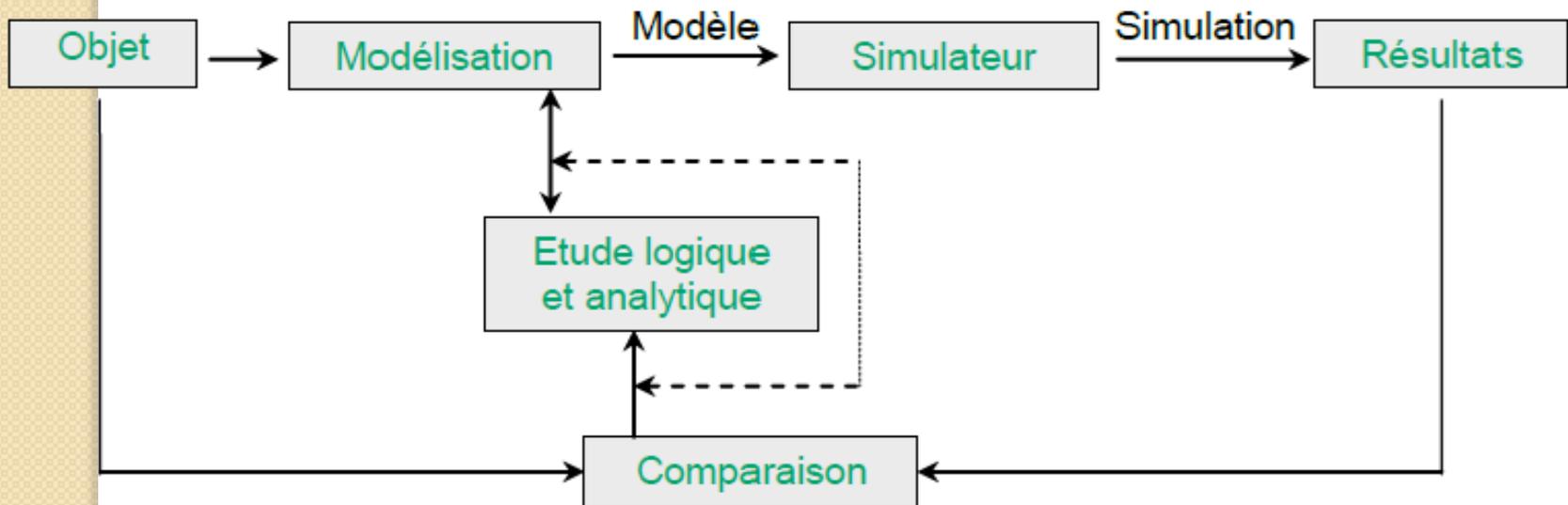


FIGURE 1 : Schéma nécessaire pour la modélisation et la simulation d'un processus

L'analyse du système, la modélisation et la simulation constituent les trois étapes fondamentales de l'étude du comportement dynamique des systèmes complexes (procédé) :

1. L'analyse du système consiste à définir les limites du système à modéliser, à identifier les éléments importants ainsi que les types de liaison et d'interaction entre ces éléments et à les hiérarchiser.
2. La modélisation vise à représenter de la meilleure façon possible un objet réel par un ou des modèles sous forme mathématique. D'une manière générale, lors de l'élaboration du modèle, trois types de données sont nécessaires :
 - les paramètres chimiques (réactions, produits formés, cinétiques et mécanismes),
 - les paramètres de transfert (matière, énergie, quantité de mouvement),
 - l'hydrodynamique caractérisant les équipements.
1. La simulation étudie le comportement d'un système. Elle permet, en particulier, d'étudier l'évolution du système en faisant varier un ou plusieurs facteurs et en confrontant les valeurs calculées aux valeurs observées.

Logiciels de simulation des procédés

Il existe un très grand nombre de logiciels de simulation des procédés chimiques sur le marché. Ci-après, on présente une liste non-exhaustive des logiciels les plus utilisés au niveau mondial :

<http://www.aspentec.com/> (Aspen)

<http://www.chemstations.net/> (Chemcad)

<http://www.winsim.com/> (DesignII)

<http://www.hyprotech.com/> (Hysys)

<http://www.ideas-simulation.com/home.php> (Ideas)

<http://www.rsi-france.com/> (Indiss)

<http://www.prosim.net/english.html> (Prosim)

<http://www.simsci-esscor.com/us/eng/default.htm> (Proll)

<http://www.rsi-france.com/> (Sim42)

<https://dwsim.fossee.in/>

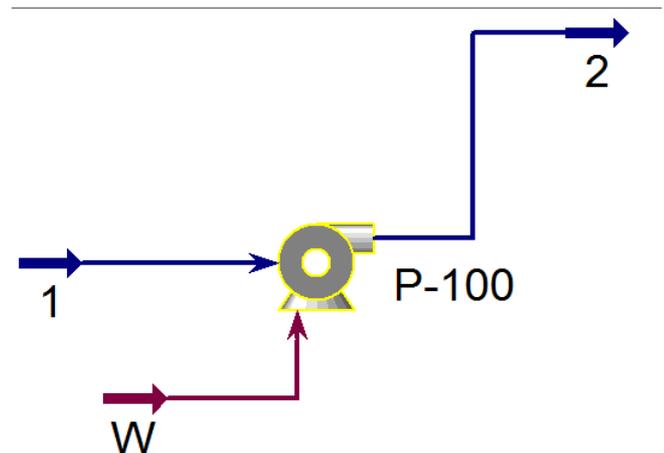
Tout simulation de procédés chimiques est organisé autour des éléments suivants:

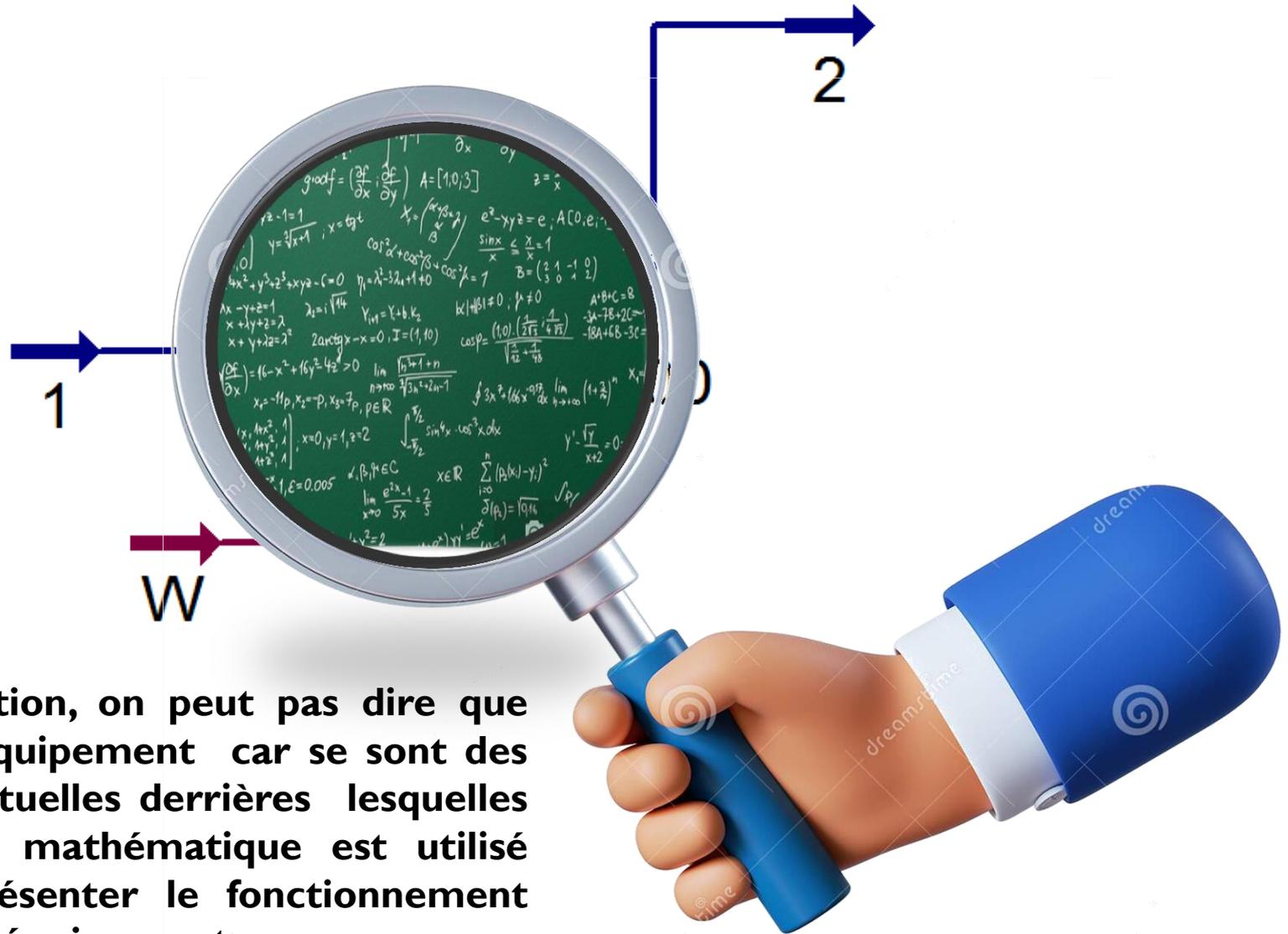
1. Une base de données des corps purs.
2. Un serveur de calcul de propriétés physicochimiques qui contient toutes les corrélations et les modèles thermodynamique.
3. Des modules de calcule des differents opérations unitaires contenant les équations relatives à leurs fonctionnement.
4. Des solveurs numériques qui consiste à résoudre un système d'équation algébrique non linéaire



Equipement

Simulation





En simulation, on peut pas dire que c'est un équipement car se sont des images virtuelles derrières lesquelles un model mathématique est utilisé pour représenter le fonctionnement de chaque équipement.

Équations d'état - Formulations mathématiques

L'équation d'état des gaz parfaits, qui relie la pression, la température et le volume spécifique, est une équation familière :

$$pV = nRT \text{ or } p\hat{v} = RT \text{ where } \hat{v} = \frac{V}{n}$$

Le terme p est la pression absolue, V est le volume, n est le nombre de moles, R est le gaz constante et T est la température absolue. Les unités de R doivent être appropriées pour les unités choisi pour les autres variables. Cette équation est tout à fait adéquate lorsque la pression est faible (telle comme une atmosphère). Cependant, de nombreux processus chimiques se déroulent à très haute pression. Dans ces conditions, l'équation d'état des gaz parfaits peut ne pas être une représentation valide de réalité. D'autres équations d'états ont été développées pour traiter les processus chimiques à haute pression. La première généralisation de la loi des gaz parfaits était l'équation d'état de van der Waals :

$$p = \frac{RT}{\hat{v} - b} - \frac{a}{\hat{v}}$$

Cette extension n'est toutefois qu'une première étape, car elle ne constituera pas une bonne approximation à des pressions extrêmement élevées. L'équation d'état de Redlich-Kwong est une modification de van der l'équation d'état de Waal, puis a été modifiée par Soave pour donner le Soave-Redlich- Équation d'état de Kwong (SRK), qui est courante dans les simulateurs de processus.

Une autre variation de l'équation d'état de Redlich-Kwong est l'équation d'état de Peng-Robinson (PR). La page suivante fournit une comparaison de la formulation utilisée dans HYSYS pour le SRK et les équations d'état PR.

	Soave-Redlich-Kwong	Peng-Robinson
	$P = \frac{RT}{\hat{v} - b} - \frac{a}{\hat{v}(\hat{v} + b)}$ $Z^3 - Z^2 + (A - B - B^2)Z - AB = 0$	$P = \frac{RT}{\hat{v} - b} - \frac{a}{\hat{v}(\hat{v} + b) + b(\hat{v} - b)}$ $Z^3 - (1 - B)Z^2 + (A - 2B - 3B^2)Z - (AB - B^2 - B^3) = 0$
where		
$b =$	$\sum_{i=1}^N x_i b_i$	$\sum_{i=1}^N x_i b_i$
$b_i =$	$0.08664 \frac{RT_{c_i}}{P_{c_i}}$	$0.077796 \frac{RT_{c_i}}{P_{c_i}}$
$a =$	$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N x_i x_j (a_i a_j)^{0.5} (1 - k_{ij})$	$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N x_i x_j (a_i a_j)^{0.5} (1 - k_{ij})$
$a_i =$	$a_{ci} \alpha_i$	$a_{ci} \alpha_i$
$a_{ci} =$	$0.42748 \frac{(RT_{c_i})^2}{P_{c_i}}$	$0.457235 \frac{(RT_{c_i})^2}{P_{c_i}}$
$\alpha_i^{0.5} =$	$1 + m_i (1 - T_{ri}^{0.5})$	$1 + m_i (1 - T_{ri}^{0.5})$
$m_i =$	$0.48 + 1.574\omega_i - 0.176\omega_i^2$	$0.37464 + 1.54226\omega_i - 0.26992\omega_i^2$

	Soave-Redlich-Kwong	Peng-Robinson
$A =$	$\frac{aP}{(RT)^2}$	$\frac{aP}{(RT)^2}$
$B =$	$\frac{bP}{RT}$	$\frac{bP}{RT}$

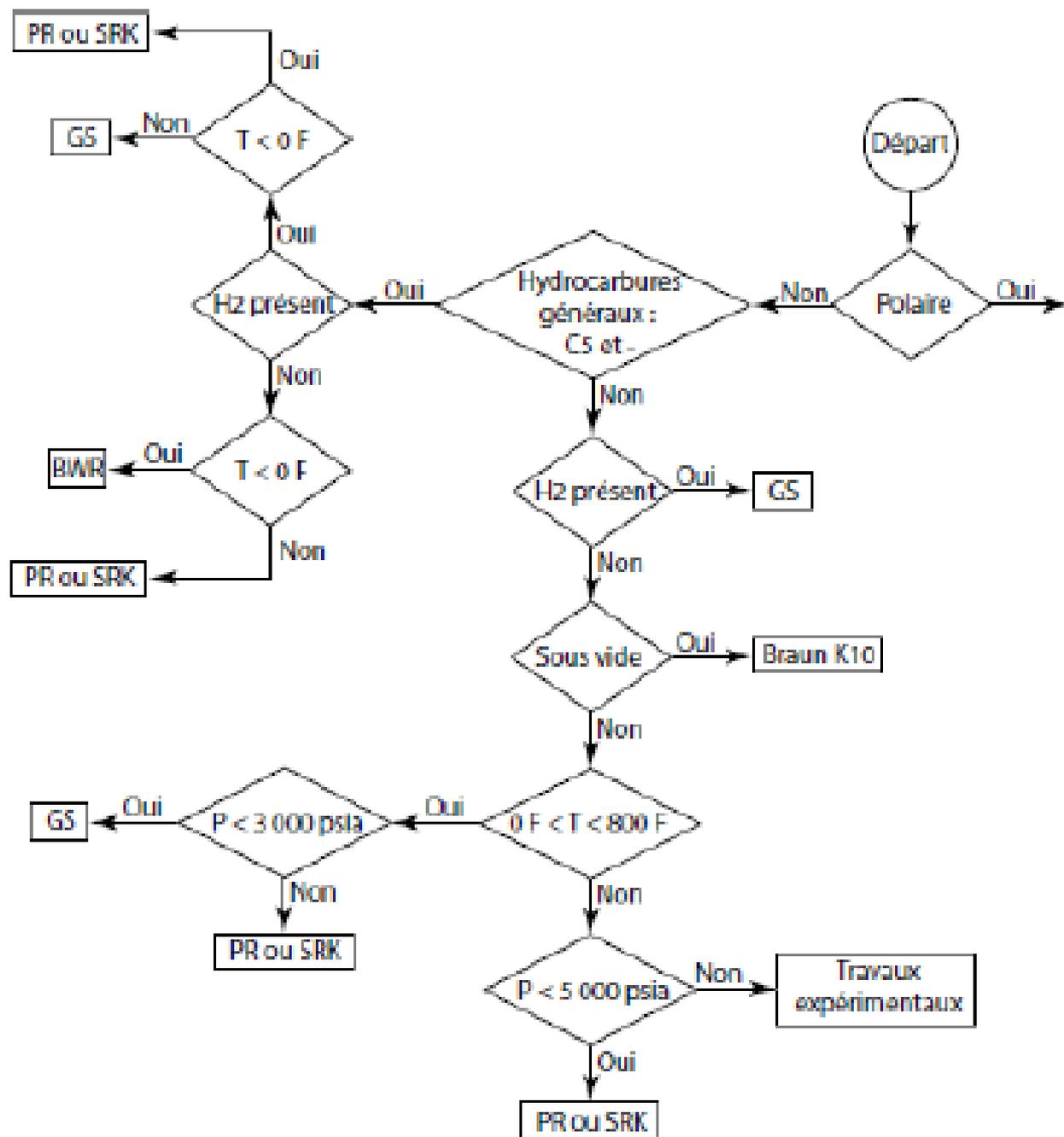
Sélection d'un modèle thermodynamique

Sur la fenêtre Prop Pkg, sélectionner le filtre EOSs (Equations of State). A l'aide de la souris choisir l'équation Peng-Robinson. Fermer cette fenêtre et observer que dans la fenêtre Simulation Basis Manager apparaît une ligne indiquant le nombre de composés sélectionnés (2) et le modèle thermodynamique choisi (Peng-Robinson).

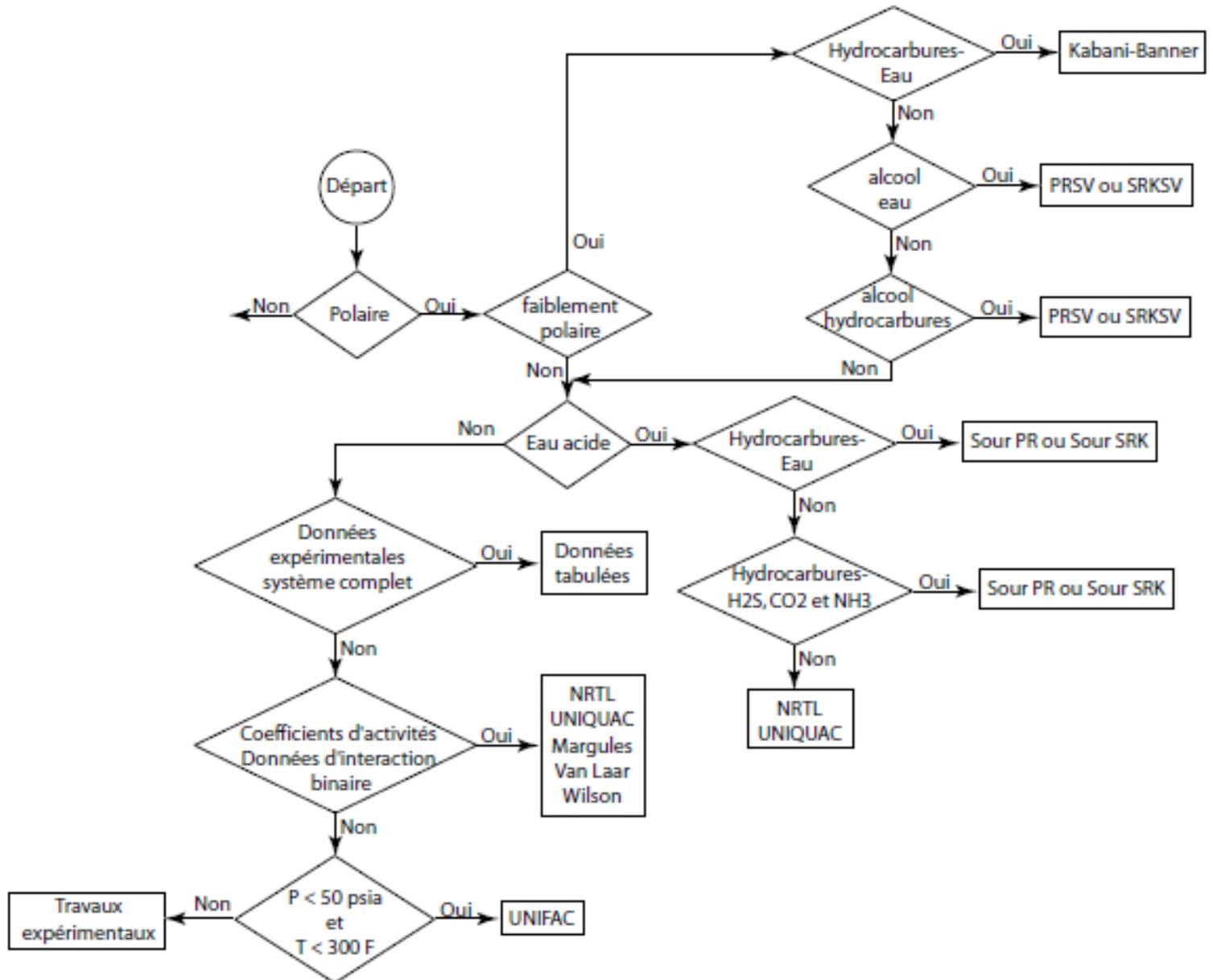
Appuyez sur le bouton Enter Simulation Environment pour aller à la fenêtre de construction du PFD. Si vous voulez modifier les composés ou le modèle thermodynamique en cours de simulation, cliqué sur le bouton Simulation Basis Environment (icône du flacon sur le toolbar).

Tableau I : Types de systèmes vs Modèles recommandés

Type of System	Recommended Property Method
TEG Dehydration	PR
Sour Water	PR, Sour PR
Cryogenic Gas Processing	PR, PRSV
Air Separation	PR, PRSV
Atm Crude Towers	PR, PR Options, GS
Vacuum Towers	PR, PR Options, GS (<10 mm Hg), Braun K10, Esso K
Ethylene Towers	Lee Kesler Plocker
High H ₂ Systems	PR, ZJ or GS (see T/P limits)
Reservoir Systems	PR, PR Options
Steam Systems	Steam Package, CS or GS
Hydrate Inhibition	PR
Chemical systems	Activity Models, PRSV
HF Alkylation	PRSV, NRTL (Contact Hyprotech)
TEG Dehydration with Aromatics	PR (Contact Hyprotech)
Hydrocarbon systems where H ₂ O solubility in HC is important	Kabadi Danner
Systems with select gases and light hydrocarbons	MBWR



L'organigramme de sélection



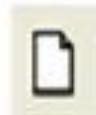
Les étapes d'utilisation du logiciel HYSYS

Pour réaliser une simulation en HYSYS, les pas suivants sont nécessaires :

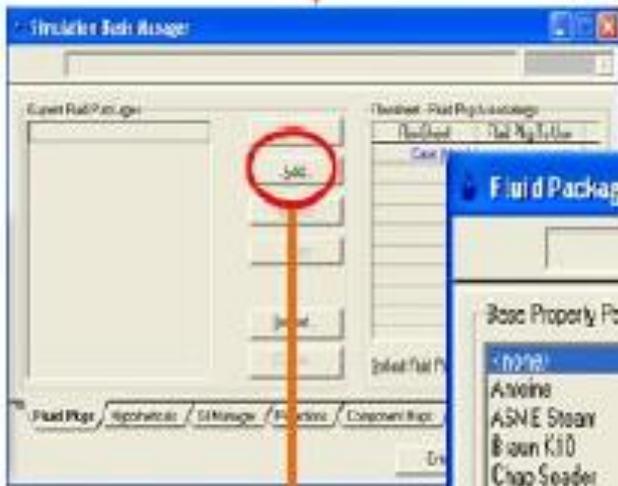
1. Choix des composés
2. Sélection d'un modèle thermodynamique
3. Construction du PFD
4. Spécification des courants et des unités
5. Exécution du programme de simulation
6. Interprétation des résultats

Choix des composés

Exécuter le programme HYSYS et choisir *New case* dans le menu *File*. Cela ouvre la fenêtre *Simulation Basis Manager*. Cliquer sur le bouton *Add*. La fenêtre *Fluid Package* s'ouvre sous l'onglet *Prop Pkg*. Aller sur l'onglet *Components*. Sélectionner les composés nécessaires à la simulation, l'un après l'autre en introduisant le nom dans la case *Match* et en cliquant à chaque fois sur *Add Pure*. Dans le cas présent on choisira *Ethane* et *Methane*. Aller ensuite sur l'onglet *Prop Pkg*.



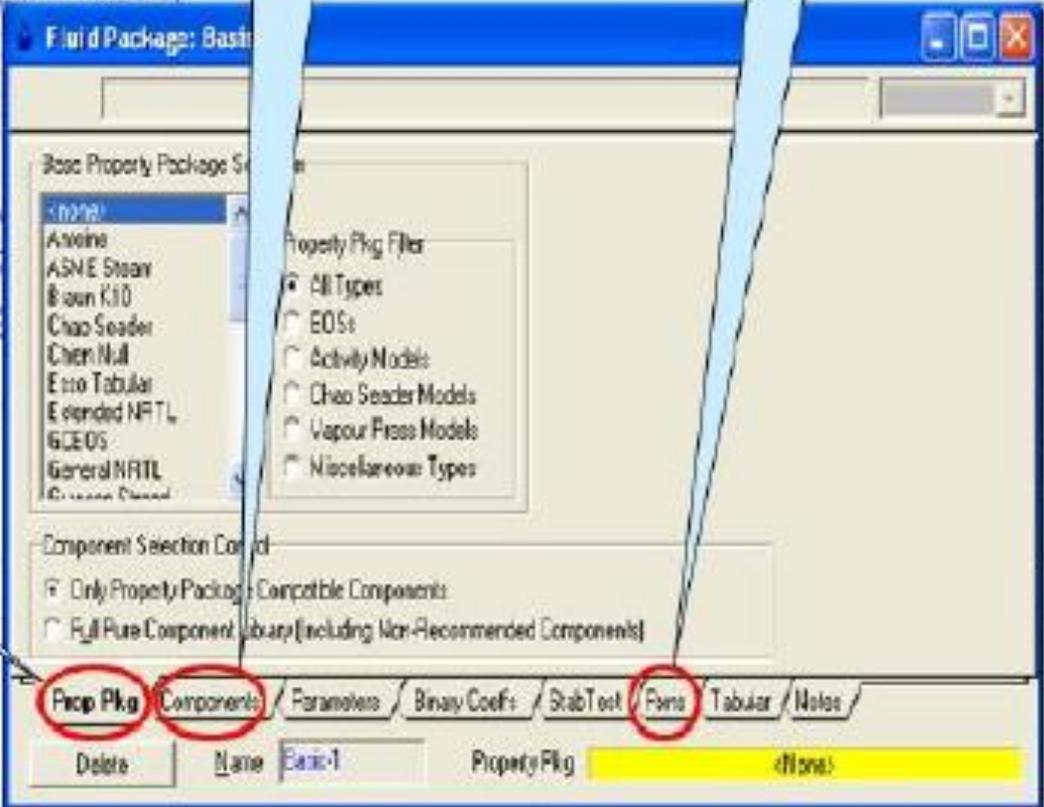
Nouvelle simulation



Choisir composés inclus dans le procédé

Choisir réactions du procédé

Choisir modèle pour calculs



Permet de consulter les propriétés de chaque composé. Ex.: T et P critiques

Choisir les composés impliqués dans toutes les étapes du procédé: en écrivant le nom au long ou la formule chimique. Un filtre (*Family Filter*) permet de trouver les composés répartis en sous-catégories

The screenshot shows the 'Fluid Package: Basic-1' software interface. The main window is divided into several sections:

- Current Component List:** A panel on the left with buttons for 'View Comp...', 'Add Compo', 'Library', 'Hypothetical', 'Add Pure', 'Substitute', 'Refresh', 'Remove Comp', and 'Sort List'.
- Components Available From The Pure Component Library:** A table with columns for 'Match', 'Use Filter', 'Family Filter...', 'SimName', 'FullName / Synonym', and 'Formula'. The table lists various hydrocarbons from Methane to n-Nonane.
- Search and Filter Options:** A search bar, a 'Use Filter' checkbox, and a 'Family Filter...' button.
- Bottom Panel:** A series of tabs for 'Prop Phg', 'Components', 'Parameters', 'Binary Coeffs', 'Stab Test', 'Rxns', 'Tabular', and 'Notes'. Below the tabs are fields for 'Delete', 'Name: Basic-1', 'Property Phg', and 'UNIQUAC - Ideal'.

Match	Use Filter	Family Filter...	SimName	FullName / Synonym	Formula
<input type="radio"/>	<input type="checkbox"/>		Methane	C1	CH4
<input type="radio"/>	<input type="checkbox"/>		Ethane	C2	C2H6
<input type="radio"/>	<input type="checkbox"/>		Propane	C3	C3H8
<input type="radio"/>	<input type="checkbox"/>		i-Butane	i-C4	C4H10
<input type="radio"/>	<input type="checkbox"/>		n-Butane	n-C4	C4H10
<input type="radio"/>	<input type="checkbox"/>		i-Pentane	i-C5	C5H12
<input type="radio"/>	<input type="checkbox"/>		n-Pentane	n-C5	C5H12
<input type="radio"/>	<input type="checkbox"/>		n-Hexane	C6	C6H14
<input type="radio"/>	<input type="checkbox"/>		n-Heptane	C7	C7H16
<input type="radio"/>	<input type="checkbox"/>		n-Octane	C8	C8H18
<input type="radio"/>	<input type="checkbox"/>		n-Nonane	C9	C9H20

1



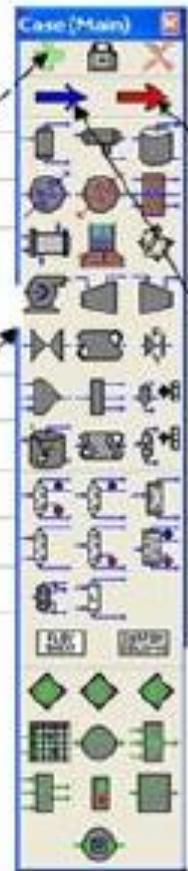
Workbook

3



Flowsheet	PFD	Tools	Window	Help
Add Stream				F11
Add Operation...				F12
Find Object...				F3
View FlowSheet Objects				
Close Object Palette				F4
Optimization Objects...				
Reaction Package...				
Fluid Package/Dynamics Model...				
User Properties...				
Flowsheet User Variables...				

2



Ajouter

Courant d'énergie

Courant matériel

→ 3 façons de construire un schéma de procédé

Comment ces équations peuvent être résolues dans le simulateur?

Degré de liberté DOF



Le nombre de degré de liberté, en mathématique est le nombre de variable (N_v) dans un ensemble d'équations indépendantes ($N_{v\text{ind}}$) auxquelles des valeurs doit être identifiées pour que l'équation puisse être résolues.

Dans le simulateur signifie le nombre de variable que vous devez spécifié si vous souhaitez résoudre une opération unitaire.

DOF pour un courant de matière de n constituant **DOF= n+2**

Exemple:

n=2 (mélange binaire)  **DOF= 4**

Pour que le Hysys démarre les calculs et que le courant converge, vous
Vous devez spécifier 4 variables

Température, Pression, Débit, Fraction molaire.

Fraction vaporisée, Température, Débite, Fraction molaire.

Fraction vaporisée, Pression, Débit, Fraction molaire.

Courants et unités

OxydeProp

70.000 kgmole/h

Worksheet	Stream Name	OxydeProp	
Conditions	Vapour / Phase Fraction	<empty>	
	Temperature [C]	24.000	
	Pressure [kPa]	111.46	
	Molar Flow [kgmole/h]	70.000	
	Mass Flow [kg/h]	<empty>	
	Liquid Volume Flow [m3/h]	<empty>	
	Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	<empty>	
	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	<empty>	
	Heat Flow [kJ/h]	<empty>	
	Std Liq Vol Flow [m3/h]	<empty>	
	Worksheet Attachments Dynamics User Variables		
	Unknown Compositions		
	Delete Define from Other Stream... ← →		

Évolution du processus de calcul

- Rouge → informations importantes manquantes
- Jaune → informations importantes données mais degré de liberté > 0
- Vert → courant ou unité complètement définis

Informations générales sur le logiciel :

Types d'environnement HYSYS et barres d'outils :

