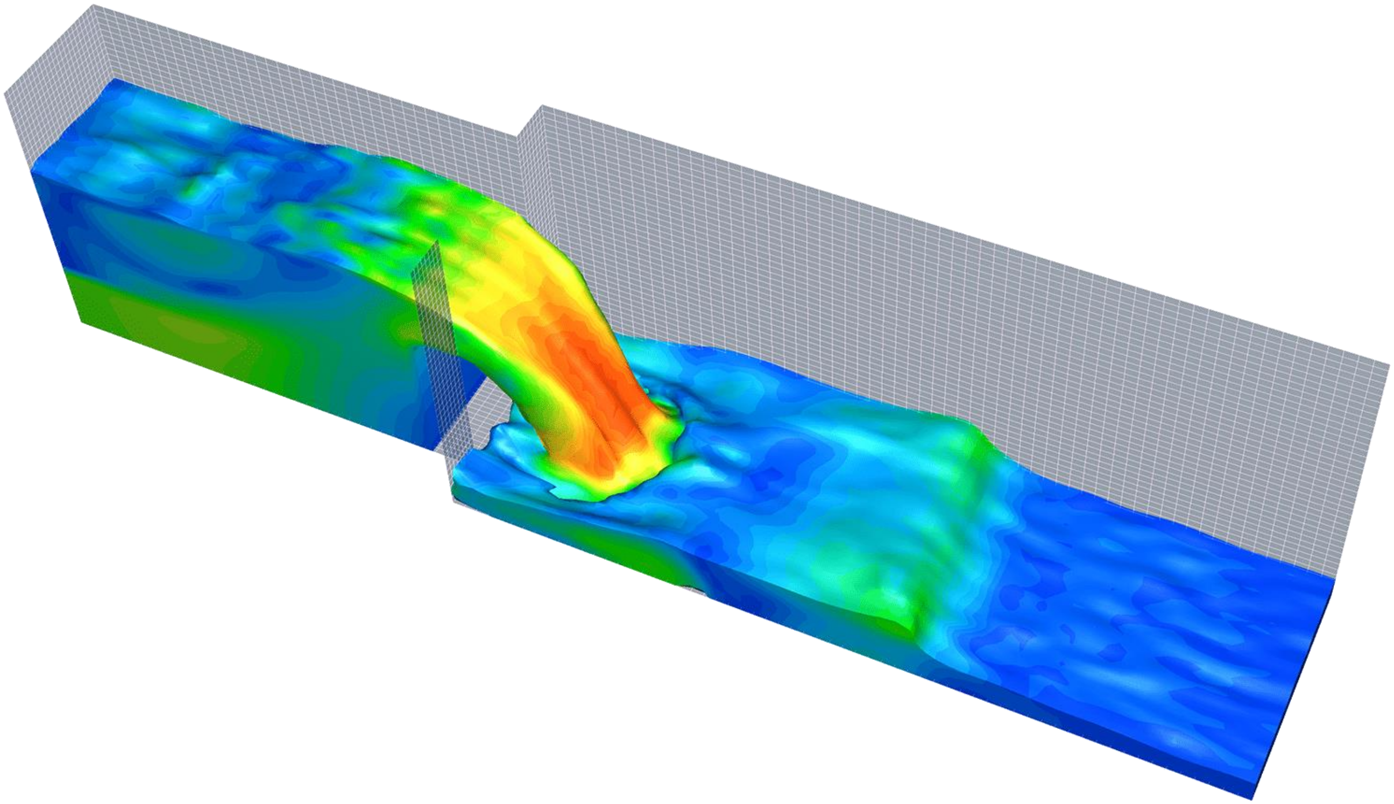
Modélisation numérique en génie chimique GCH2535

Bilans de matière et d'énergie



Diapositives adaptées de :
David Vidal
Bruno Blais
François Bertrand

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL
LE GÉNIE EN PREMIÈRE CLASSE

Géniechimique POLYTECHNIQUE

Semaine	Date	Séance	Notes	Sujet
2	Mercredi 8 Jan	1		EDP
2	Jeudi 9 Jan	2		EDP
3	Mercredi 15 Jan	3		EDP
3	Jeudi 16 Jan	4	Départ Devoir 1 (EDP)	EDP
4	Mercredi 22 Jan	5		EDP
4	Jeudi 23 Jan	6		TD#1
5	Mercredi 29 Jan	7	Remise Devoir 1 (EDP)	Intro
5	Jeudi 30 Jan	8		Intro / EDO
6	Mercredi 5 Fév	9	Partiel 1 (EDP)	CP#1
6	Jeudi 6 Fév	10		EDO
7	Mercredi 12 Fév	11	Départ Devoir 2 (MDF)	TD#2
7	Jeudi 13 Fév	12		MDF
8	Mercredi 19 Fév	13		MDF
8	Jeudi 20 Fév	14		MEF
9	Mercredi 26 Fév	15		TD#3 (LAB-MDF)
9	Jeudi 27 Fév	16		MEF
10	Mercredi 4 Mar		Relâche	
10	Jeudi 5 Mar		Relâche	
11	Mercredi 11 Mar	17	Remise Devoir 2 (MDF)	TD#4 (LAB-MEF)
11	Jeudi 12 Mar	18	Partiel 2 (EDO-MDF-MEF)	CP#2
12	Mercredi 18 Mar	19		Données exp.
12	Jeudi 19 Mar	20	Départ Devoir 3	Données exp.
13	Mercredi 25 Mar	21		Bilans
13	Jeudi 26 Mar	22		TD#5
14	Mercredi 1 Avr	23		Bilans
14	Jeudi 2 Avr	24		Opt./Rec.
15	Mercredi 8 Avr	25	Remise Devoir 3	Opt./Rec.
15	Jeudi 9 Avr	26		TD#6

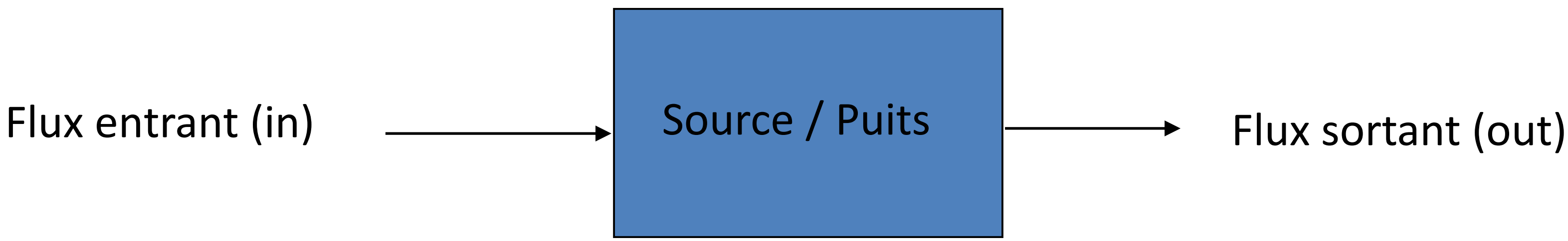
Objectif du chapitre

On se propose de montrer à l'aide d'exemples concrets du génie chimique comment des **bilans** d'**énergie** et de **matière mènent** à des **systèmes linéaires** ou **non-linéaires** dont la **résolution** permet d'obtenir la valeur des variables faisant partie de ces bilans (ex. débit)

Formulation mathématique

La formulation mathématique du bilan de masse repose sur le type d'opération unitaire. On considère ici le cas du **régime permanent** (pas d'accumulation).

Forme générale

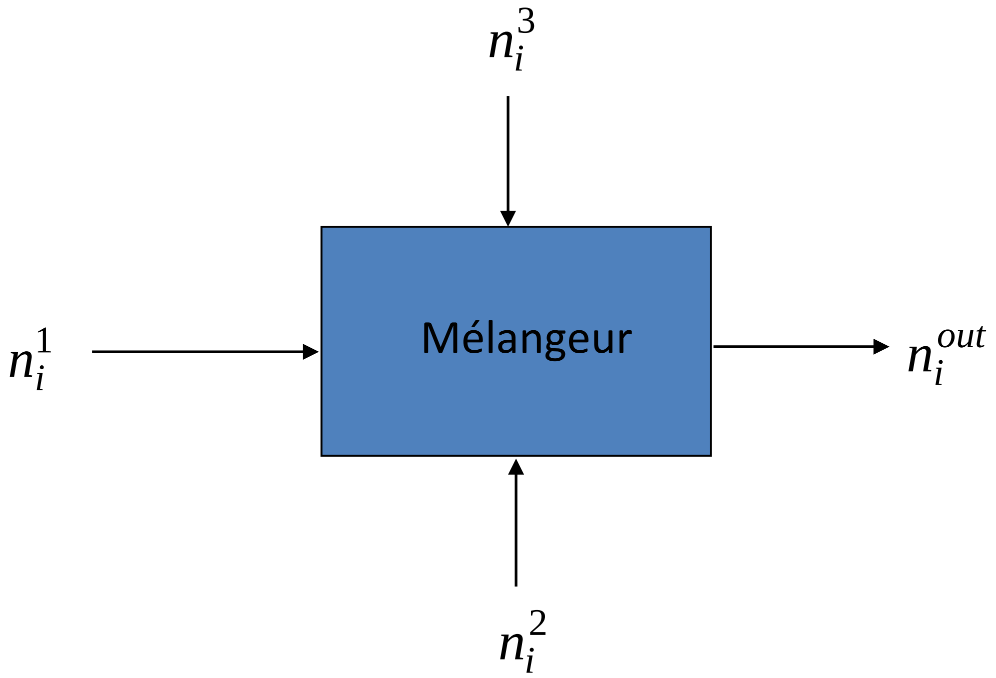


OUT = IN + SOURCE – PUITS

OUT = IN + GÉNÉRÉ - CONSOMMÉ

Type d'opération unitaire

Mélangeur



n_i^j débit massique entrant du composé "*i*" par le flux "*j*".

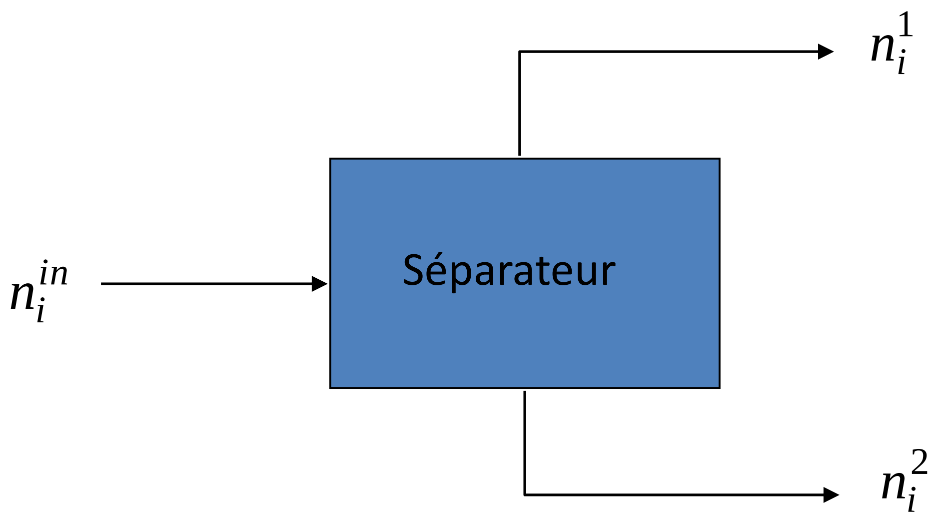
n_i^{out} débit massique sortant du composé "*i*".

$$\boxed{n_i^{out} = \sum_{j=1}^{N} n_i^j}$$

N nombre de flux entrants

Type d'opération unitaire

Séparateur



n_i^j débit massique sortant du composé "*i*" par le flux "*j*".

n_i^{in} débit massique entrant du composé "*i*".

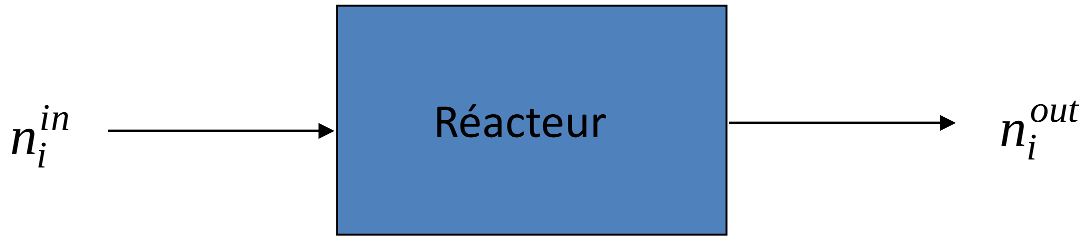
$$n_i^1 = n_i^{in}.(1 - K_i)$$

$$n_i^2 = n_i^{in}.K_i$$

K_i coefficient de partage du composé "*i*".

Type d'opération unitaire

Réacteur



$$aA + bB \rightarrow cC + dD$$

N g de A réagit avec N×(b/a) g de B pour produire N×(c/a) g de C et N×(d/a) g de D. On désigne ici par a,b,c et d les coefficients stœchiométriques massiques.

n_i^{in} débit massique entrant du composé "*i*" .

n_i^{out} débit massique sortant du composé "*i*".

$$\boxed{\begin{array}{ll} n_A^{out} = n_A^{in} - n_A^{in}\alpha & n_B^{out} = n_B^{in} - \frac{b}{a} n_A^{in}\alpha \\ n_C^{out} = n_C^{in} + \frac{c}{a} n_A^{in}\alpha & n_D^{out} = n_D^{in} + \frac{d}{a} n_A^{in}\alpha \end{array}}$$

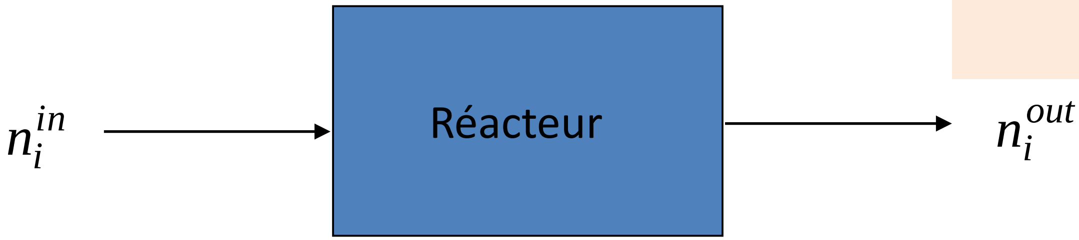
α coefficient de conversion de A

NB: $\alpha_{réact} = \frac{n_{réact}^{in} - n_{réact}^{out}}{n_{réact}^{in}}$

Type d'opération unitaire

Réacteur

ATTENTION AUX UNITÉS! ☺



$$aA + bB \rightarrow cC + dD$$

N moles de A réagit avec N×(b/a) moles de B pour produire N×(c/a) moles de C et N×(d/a) moles de D. On désigne ici par a,b,c et d les coefficients stœchiométriques molaires.

n_i^{in} débit massique entrant du composé "*i*" .

n_i^{out} débit massique sortant du composé "*i*".

$$n_A^{out} = n_A^{in} - n_A^{in}\alpha \qquad n_B^{out} = n_B^{in} - \frac{b}{a} n_A^{in}\alpha \times \frac{M_b}{M_a}$$

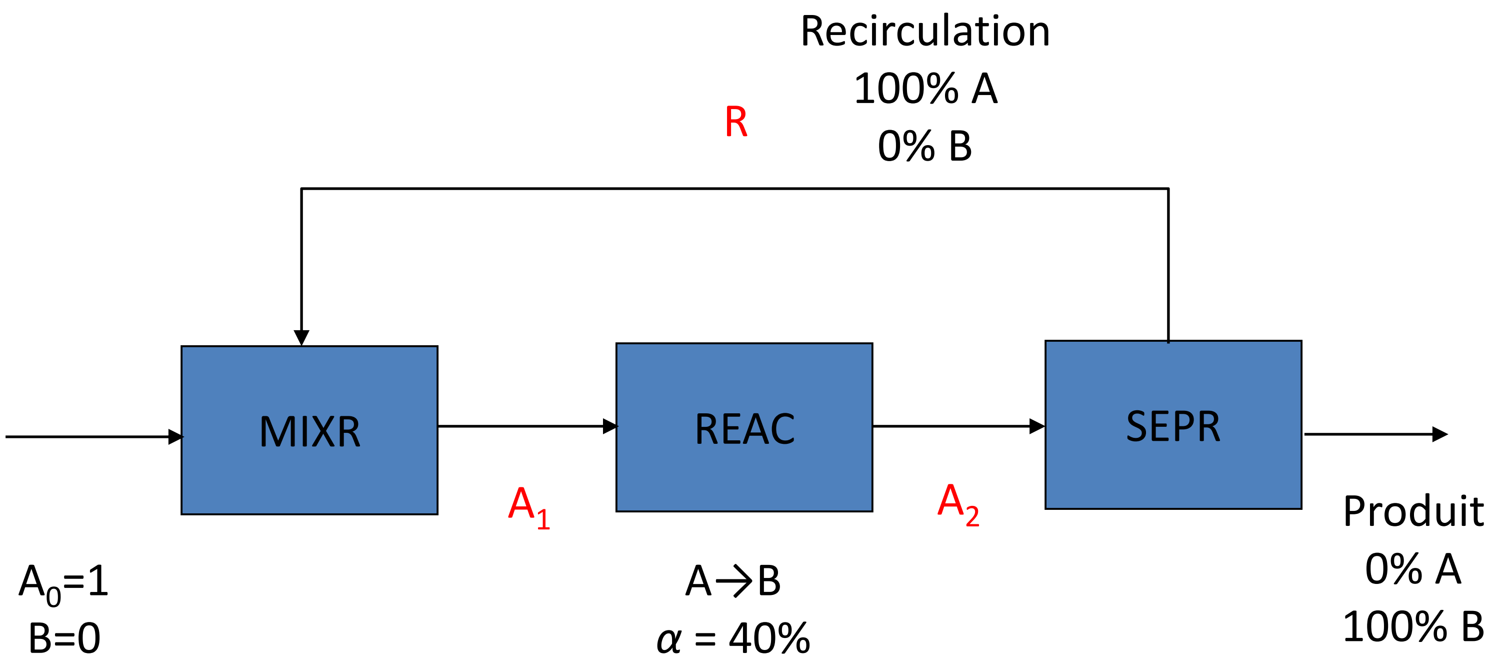
$$n_C^{out} = n_C^{in} + \frac{c}{a} n_A^{in}\alpha \times \frac{M_c}{M_a} \qquad n_D^{out} = n_D^{in} + \frac{d}{a} n_A^{in}\alpha \times \frac{M_d}{M_a}$$

α coefficient de conversion de A

M_i la masse molaire du composé "*i*"

Exemple 1

On veut déterminer le débit recyclé R du produit A pour le procédé muni d'une boucle de recirculation comme suit:



Bilan de matière dans le réacteur: solution analytique

$$A^{out} = (1-K)(A^{in}+R)$$

Or

$$R = A^{out}$$

D'où

$$R = (1-K)(A^{in}+R)$$

Soit

$$R.K = (1-K)A^{in}$$

Finalement

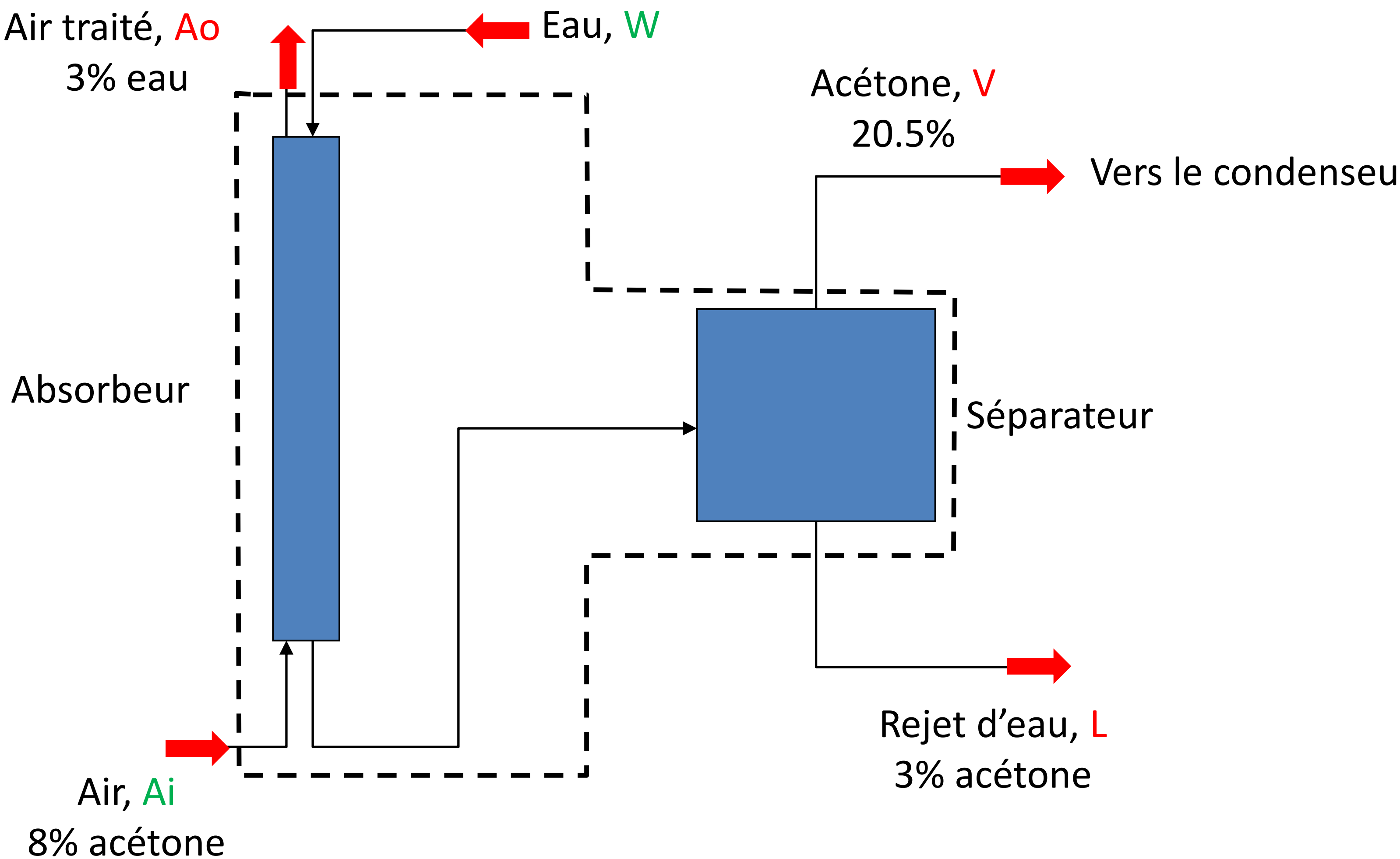
$$R = (1/K-1)A^{in}$$

Application numérique:

$$R = (1/0.4-1)\times 1.0 = 1.5$$

Exemple 2

On veut récupérer de l'acétone par un procédé de séparation



Question

a) Déterminez le bilan de matière du procédé de producton de l'acétone.

b) Quel serait la concentration d'acétone contenue dans le débit V allant vers le condenseur si Ai=600 lb/h et W = 500 lb/h?

Solution

Dans ce système nous avons trois composantes: l'eau, l'air et l'acétone.

De plus, nous avons:

- x correspond à la fraction massique d'acétone dans le rejet d'eau.
- y correspond à la fraction massique d'acétone dans la vapeur allant vers le condenseur.
- Ao est le débit d'air traité.
- Ai débit d'air sec devant être traité.
- V débit d'acétone en provenance du séparateur.
- L débit du rejet d'eau en provenance du séparateur.
- W débit d'eau vers l'absorbeur.

a) Bilan de matière:

Air	(1-8%)Ai = (1-3%)Ao
Acétone	8%Ai = yV + 3%L
Eau	W = 3%Ao + (1-y)V + (1-3%)L

Les inconnues sont Ao, V et L ce qui donne le système d'équations de rang 3 suivant:

$$\begin{bmatrix} (1-3\%) & 0 & 0 \\ 0 & y & 3\% \\ 3\% & (1-y) & (1-3\%) \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} Ao \\ V \\ L \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} (1-8\%)Ai \\ 8\%Ai \\ W \end{Bmatrix}$$

Application numérique

$$\begin{bmatrix} 0.97 & 0 & 0 \\ 0 & 0.615 & 0.03 \\ 0.03 & 0.385 & 0.97 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} Ao \\ V \\ L \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 552 \\ 48 \\ 500 \end{Bmatrix}$$

Le système ci-dessus admet pour solution:

Ao = 569 lb/hr

V = 54.8 lb/hr

L = 476 lb/hr

b) La performance du procédé est donnée par

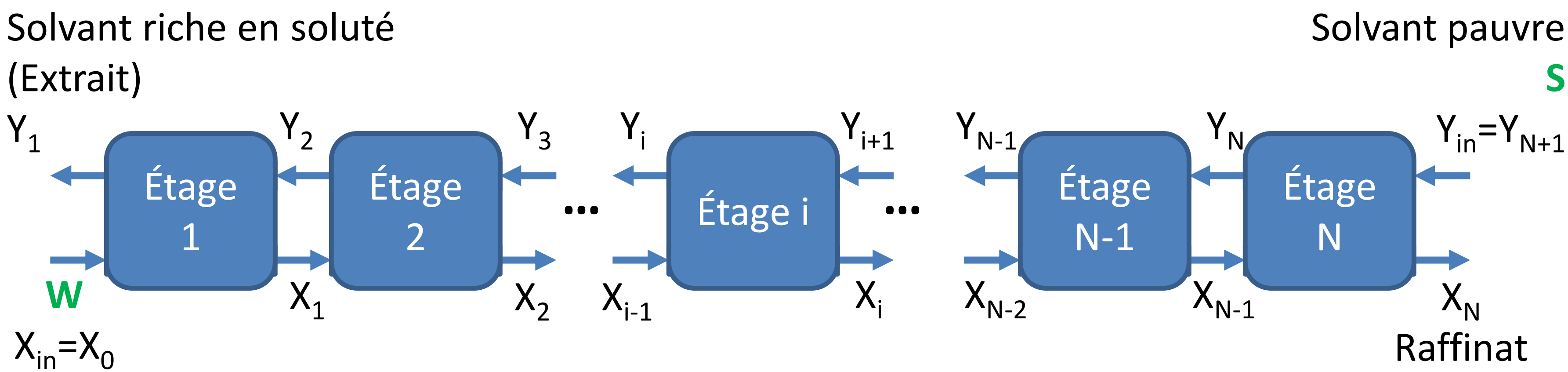
y.V.100% / 8%Ai =

0.615x(54.8)x1 / 0.08x600 = 70.2%

Ce procédé permet ainsi de récupérer 70.2 % de l’acétone entrant.

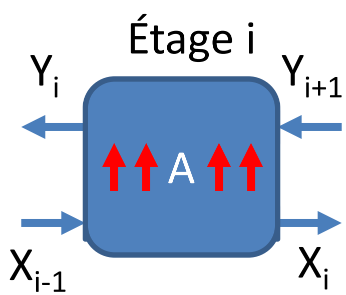
Exemple 3

Extraction liquide-liquide par étages (ou plateaux) avec un solvant immiscible



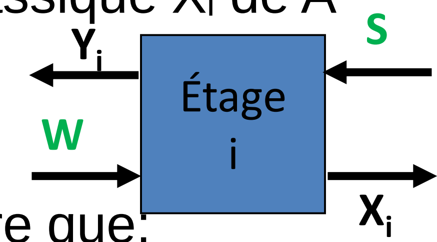
W: débit en kg/h de produit contenant une fraction massique X_{in} de matière A.

S: débit en kg/h de solvant contenant une fraction massique Y_{in} de matière A.



Au fur et à mesure que le solvant progresse d'étage en étage, il retient de plus en plus de matière A, extrayant ainsi A du produit.

À chaque étage *i*, on suppose un équilibre entre la fraction massique X_i de A dans le produit et la fraction massique Y_i de A dans le solvant.



Si on néglige les variations de température, on peut alors écrire que:

$$\boxed{Y_i = K.X_i \ , \ \forall i = 1,2,\ldots,N} \qquad (1)$$

Supposons que X_i et Y_i sont petites et qu'ainsi W et S ne varient pas au cours du procédé. Un bilan de A autour du *i*ème étage (plateau *i*) nous donne alors:

$$X_{i-1}.W + Y_{i+1}.S = X_i.W + Y_i.S, \ \forall i = 2,3,\ldots,N-1$$

Ou encore à l'aide de (1)

$$X_{i-1} - \left[1 + \frac{K.S}{W}\right].X_i + \frac{K.S}{W} X_{i+1} = 0, \ \forall i = 2,3,\ldots,N-1$$

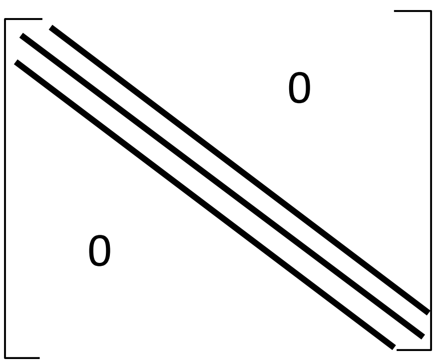
Conditions aux extrémités du procédé:

on a également pour les étages 1 et N respectivement:

$$-\left[1+\frac{K.S}{W}\right].X_1+\frac{K.S}{W}X_2=-X_{IN}$$

$$X_{N-1}-\left[1+\frac{K.S}{W}\right].X_N=-\frac{S}{W}Y_{IN}$$

On obtient ainsi un système linéaire d'équations dont la matrice est tridiagonale:



Application numérique

Soient les conditions suivantes:

$$S = 1000\,kg/h \qquad X_{IN} = 0.05 \qquad K = 10$$

$$W = 2000\,kg/h \qquad Y_{IN} = 0.00 \qquad N = 10$$

Les fractions massiques sont alors obtenues en résolvant le système tridiagonal de dimension 10 (comment ?):

$$-6X_1 + 5X_2 = -0.05$$

$$\vdots$$

$$X_{i-1} - 6X_i + 5X_{i+1} = 0, \quad (i = 2,3,..9)$$

$$\vdots$$

$$X_9 - 6X_{10} = 0$$

dont la solution est:

$$X_1 = 0.999 \times 10^{-2} \qquad X_6 = 0.319 \times 10^{-5}$$

$$X_2 = 0.199 \times 10^{-2} \qquad X_7 = 0.638 \times 10^{-6}$$

$$X_3 = 0.399 \times 10^{-3} \qquad X_8 = 0.126 \times 10^{-6}$$

$$X_4 = 0.799 \times 10^{-4} \qquad X_9 = 0.245 \times 10^{-7}$$

$$X_5 = 0.159 \times 10^{-4} \qquad X_{10} = 0.409 \times 10^{-8}$$

On obtient alors un rendement d'extraction (% de A entrant qui est récupéré par le solvant) de:

$$\frac{(Y_1 - Y_{IN})S}{X_{IN}.W} = \frac{(K.X_1 - Y_{IN})S}{X_{IN}.W} =$$

$$\frac{\left[10 \times \left(0.999 \times 10^{-2}\right) - 0.00\right] \times 1000}{0.05 \times 2000} = 99.9\%$$

Le rendement serait bien sûr moins élevé si le procédé d'extraction comportait moins d'étages (ou plateaux).

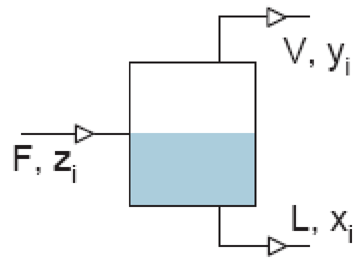
Exemple 4

évaporateur “Flash” (équation de Rachford-Rice)

La composition du débit entrant F d’un mélange d’hydrocarbures est donnée dans le tableau suivant:

Composants	z_i	K_i
n-Butane	0.25	2.13
n-Pentane	0.45	1.10
n-Hexane	0.30	0.59

Calculez les débits de vapeur V et liquide L ainsi que les fractions molaires x_i et y_i si le débit à l’entrée F = 10



x_i : fraction molaire du produit *i* dans la phase liquide.

y_i : fraction molaire du produit *i* dans la phase vapeur.

Bilan de matière global

$$F = V + L$$

Bilan de matière pour chaque produit

$$z_i F = y_i V + x_i L$$

Ou encore

$$z_i F = K_i x_i V + x_i L = x_i (K_i V + L)$$

$$z_i = x_i (K_i \frac{V}{F} + \frac{L}{F})$$

$$z_i = x_i (\frac{V}{F}(K_i - 1) + \underbrace{\frac{V}{F} + \frac{L}{F}}_{=1})$$

Nous obtenons alors

$$x_i = \frac{z_i}{\left[\left(\frac{V}{F}\right)(K_i - 1) + 1\right]} \tag{2}$$

De la même façon pour y_i nous obtenons:

$$y_i = \frac{z_i K_i}{\left[\left(\frac{V}{F}\right)(K_i - 1) + 1\right]} \tag{3}$$

Si on considère que

$$\sum x_i = 1; \sum y_i = 1$$

Alors

$$\sum y_i - \sum x_i = 0 \tag{4}$$

En vertu de (2) et (3), on réécrit (4) sous la forme suivante:

$$\sum_{i=1}^{N} \frac{z_i K_i}{\left[\left(\frac{V}{F}\right)(K_i - 1) + 1\right]} - \sum_{i=1}^{N} \frac{z_i}{\left[\left(\frac{V}{F}\right)(K_i - 1) + 1\right]} = 0$$

Soit après simplification:

$$\sum_{i=1}^{N} \frac{z_i (K_i - 1)}{\left[\left(\frac{V}{F}\right)(K_i - 1) + 1\right]} = 0 \qquad \text{(eq. Rachford-Rice)}$$

Le problème revient à déterminer le rapport (V/F). Il s'agit pour cela de trouver la racine d'un polynôme de degré N-1.

On pose donc:

$$f\left(\frac{V}{F}\right) = \sum_{i=1}^{N} \frac{z_i (K_i - 1)}{\left[\left(\frac{V}{F}\right)(K_i - 1) + 1\right]} = 0$$

On pose également

$$x = \frac{V}{F} \qquad \alpha_i = (K_i - 1)$$

L'équation de Rachford-Rice devient

$$f(x) = \sum_{i=1}^{N} \frac{z_i \alpha_i}{x\alpha_i + 1} = \sum_{i=1}^{N} \frac{z_i}{x + \dfrac{1}{\alpha_i}} = 0$$

Pour le présent problème N=3, et l'équation réduite au même dénominateur donne

$$f(x) = \frac{z_1\left(x + \dfrac{1}{\alpha_2}\right)\left(x + \dfrac{1}{\alpha_3}\right) + z_2\left(x + \dfrac{1}{\alpha_1}\right)\left(x + \dfrac{1}{\alpha_3}\right) + z_3\left(x + \dfrac{1}{\alpha_1}\right)\left(x + \dfrac{1}{\alpha_2}\right)}{\prod_{i=1}^{N}\left(x + \dfrac{1}{\alpha_i}\right)} = 0$$

ou plus simplement

$$z_1\left(x+\frac{1}{\alpha_2}\right)\left(x+\frac{1}{\alpha_3}\right)+z_2\left(x+\frac{1}{\alpha_1}\right)\left(x+\frac{1}{\alpha_3}\right)+z_3\left(x+\frac{1}{\alpha_1}\right)\left(x+\frac{1}{\alpha_2}\right)=0$$

ou encore

$$\left(\underbrace{z_1+z_2+z_3}_{=1}\right)x^2+\left[z_1\left(\frac{1}{\alpha_2}+\frac{1}{\alpha_3}\right)+z_2\left(\frac{1}{\alpha_1}+\frac{1}{\alpha_3}\right)+z_3\left(\frac{1}{\alpha_1}+\frac{1}{\alpha_2}\right)\right]x+\frac{z_1}{\alpha_2\alpha_3}+\frac{z_2}{\alpha_1\alpha_3}+\frac{z_3}{\alpha_1\alpha_2}=0$$

Après simplification on obtient le polynôme quadratique

$$x^2+\left[z_1\left(\frac{1}{\alpha_2}+\frac{1}{\alpha_3}\right)+z_2\left(\frac{1}{\alpha_1}+\frac{1}{\alpha_3}\right)+z_3\left(\frac{1}{\alpha_1}+\frac{1}{\alpha_2}\right)\right]x+\frac{z_1}{\alpha_2\alpha_3}+\frac{z_2}{\alpha_1\alpha_3}+\frac{z_3}{\alpha_1\alpha_2}=0$$

Application numérique

En remplaçant les paramètres par leurs valeurs respectives, on trouve le polynôme quadratique suivant

$$x^2 + 4.456x - 4.414 = 0$$

qui admet pour solution

$$x = \frac{V}{F} = 0.834$$

Soit

$$V = 0.834 \times F = 83.4\, lb.moles / hr$$

$$L = F - V = 100 - 83.4 = 16.6\, lb.moles / hr$$

Pour x_i et yi nous obtenons à partir de (2) et (3) le tableau suivant:

Composants	x_i	y_i
n-Butane	0.129	0.275
n-Pentane	0.415	0.457
n-Hexane	0.456	0.268

Racine polynômiale

Il arrive qu'il faille effectuer l'opération inverse à savoir de déterminer la valeur de x pour un y donné:

$$x = f^{-1}(y)$$

où la fonction f est connue mais pas son inverse.
Dans le cas où f est un polynôme, l'exercice revient donc à chercher la racine du polynôme soit:

$$F(x) = f(x) - y = 0$$

Pour des polynômes d'ordres élevés (n>2) alors une façon de calculer x est d'avoir recours à une méthode itérative.

Méthode de Newton

algorithme

$$x = x^{(0)}$$

$$x^{(i+1)} = x^{(i)} - \frac{F(x^{(i)})}{F'(x^{(i)})}$$

$$\left\| x^{(i+1)} - x^{(i)} \right\| \leq \varepsilon$$

$$x^{(i)} = x^{(i+1)}$$

Remarque: il existe plusieurs autres telles que la bissection, par approximations successives, de la sécante,…