

# Modélisation de systèmes industriels : Approches et exemples d'applications

Wilmar URIBE-SOTO

Doctorant, Projet VALORCO, CNRS-LRGP

Nancy, le 9 novembre 2017, Journée J3P, « Approches de modélisation à différentes échelles : de leur développement à leur application »

LABORATOIRE

REACTIONS AND



REACTIONS ET GENIE DES PROCÉDES

CHEMICAL ENGINEERING LABORATORY



UNIVERSITÉ  
DE LORRAINE

# Introduction

## Modélisation de systèmes industriels, Pourquoi?

- **La conception des procédés:**  
Support de l'analyse de faisabilité
- **L'optimisation des procédés:**  
Amélioration de leur fiabilité, performance et sécurité
- **La mise au point d'une nouvelle technique d'analyse:**  
Méthode indirecte
- **La mise au point d'un nouveau procédé ou produit:**  
Extrapolation des résultats, stratégie expérimentale, etc.



**Améliorer, structurer et quantifier la connaissance des procédés pour augmenter leur profitabilité**

# Plan

---

## Modèles et approches

## Exemples d'application

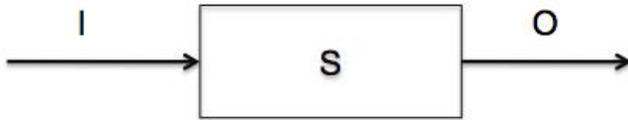
- Choix d'un type de modèle
- Développement du modèle
- Mise en œuvre du modèle

## Conclusion

# Modèles et approches

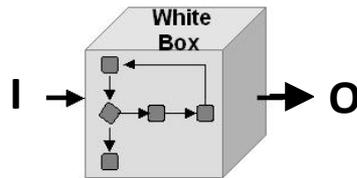


Qu'est-ce qu'un modèle?

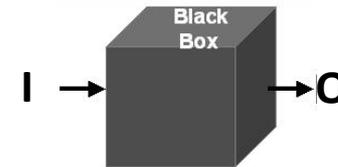


Rendement =  
 $f(\text{Alimentation, Cond. Opératoires, Volume, ...})$

## Modèles de Connaissance

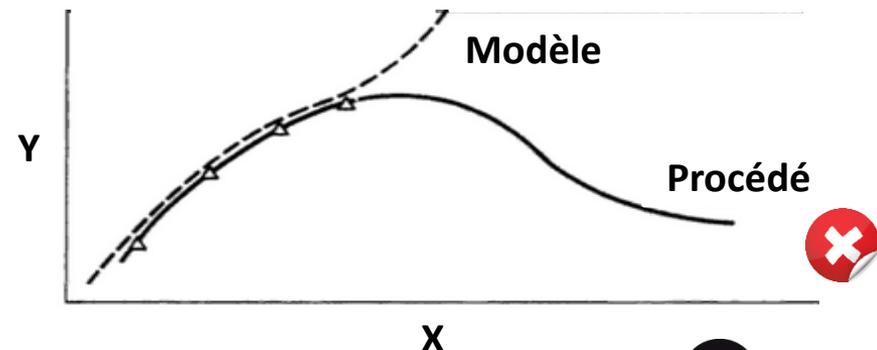
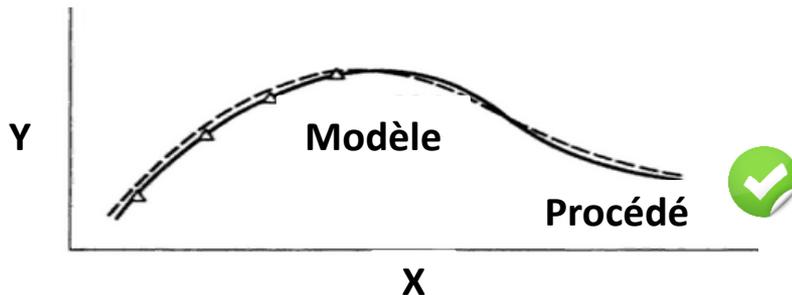


## Modèles Statistiques



Modèles détaillés    Modèles simplifiés

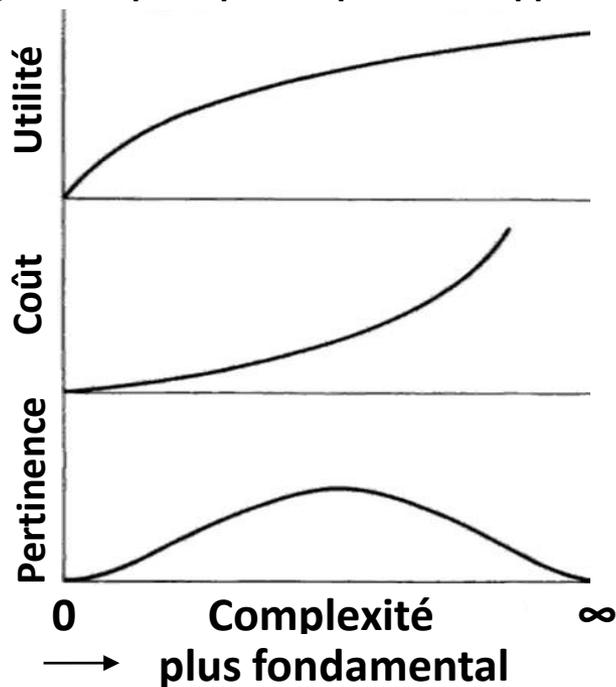
Mesures physiques    Simulation détaillée



# Modèles et approches

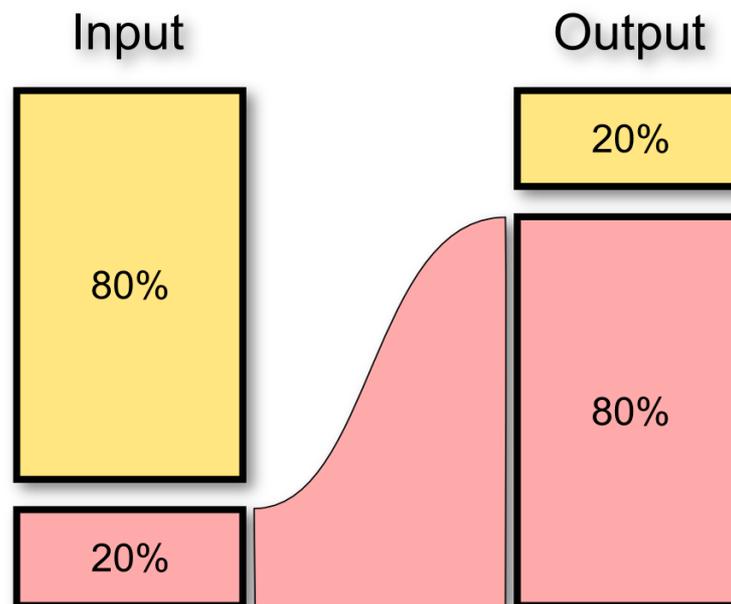
## Principe de Prater

(Prater's principle of optimum sloppiness)



**La complexité du modèle ne doit pas être une finalité**

## Principe de Pareto



**Il faut déterminer le(s) phénomène(s) qui ont le plus d'influence sur les résultats du modèle**

**Un bon modèle est un modèle pertinent, facilement ajustable, précis, robuste et légèrement extrapolable**

# Plan

---

Modèles et approches

## Exemples d'application

- Choix d'un type de modèle
- Développement du modèle
- Mise en œuvre du modèle

Conclusion

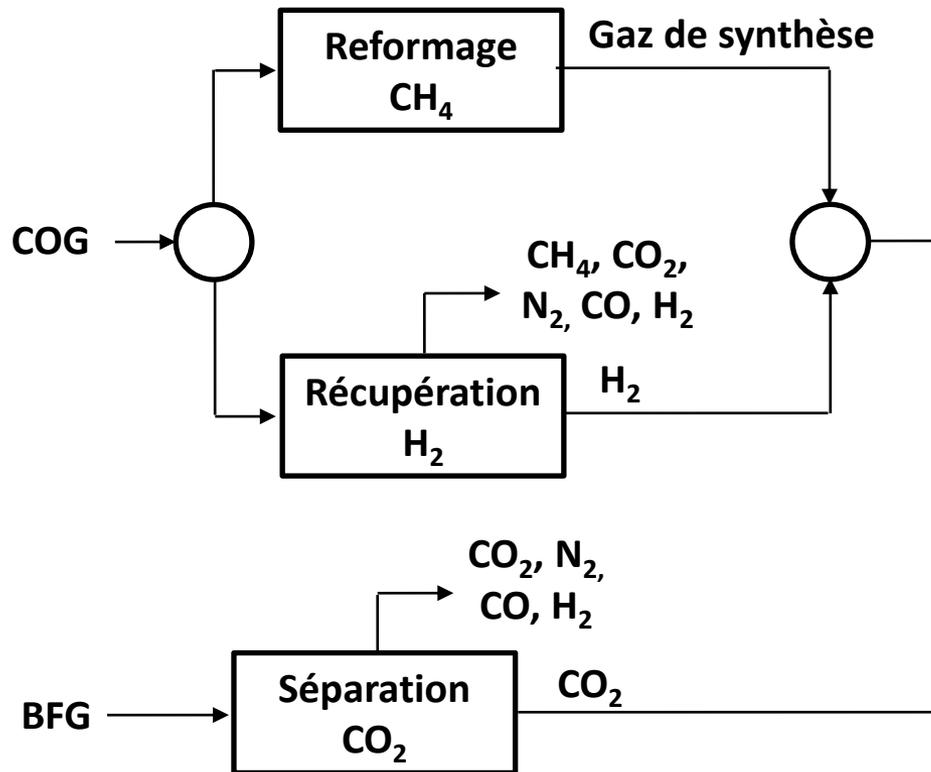
# Exemples d'application



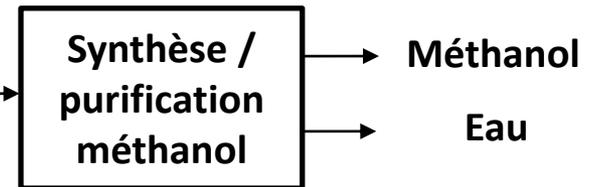
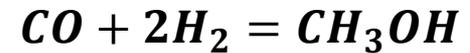
## Projet VALORCO : Valorisation thermochimique des gaz sidérurgiques

|                               |      |
|-------------------------------|------|
| CO <sub>2</sub>               | 1,2  |
| CO                            | 4,3  |
| H <sub>2</sub>                | 63,0 |
| CH <sub>4</sub>               | 22,5 |
| C <sub>x</sub> H <sub>y</sub> | 2,5  |
| N <sub>2</sub>                | 6,0  |
| Ar                            | 0,2  |

|                               |      |
|-------------------------------|------|
| CO <sub>2</sub>               | 22,5 |
| CO                            | 24,4 |
| H <sub>2</sub>                | 3,8  |
| CH <sub>4</sub>               | 0,0  |
| C <sub>x</sub> H <sub>y</sub> | 0,0  |
| N <sub>2</sub>                | 48,5 |
| Ar                            | 0,6  |

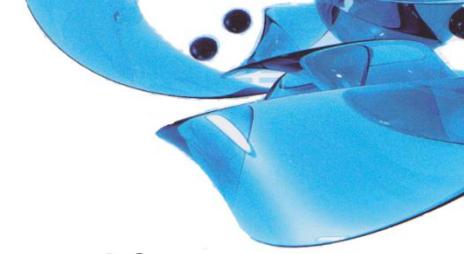


$$M = \frac{F_{H_2} - F_{CO_2}}{F_{CO} + F_{CO_2}} \sim 2$$



$$(\% N_2 + \% CH_4) < 5 \%$$

# Exemples d'application



## Projet VALORCO : Valorisation thermochimique des gaz sidérurgiques

### Unités à modéliser

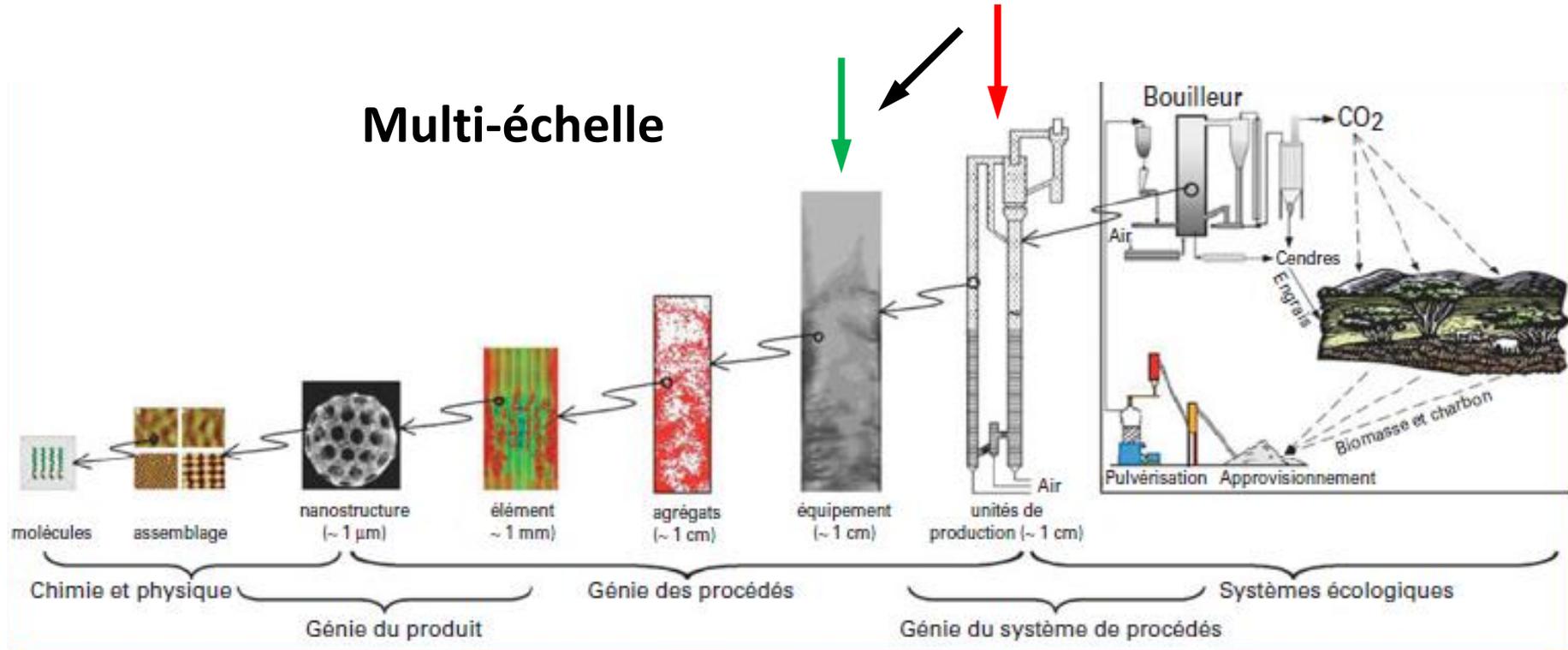
|                                   |                        |
|-----------------------------------|------------------------|
| <b>Séparation CO<sub>2</sub></b>  | Absorption chimique    |
| <b>Récupération H<sub>2</sub></b> | Séparation membranaire |
|                                   | PSA                    |

|                                 |                        |
|---------------------------------|------------------------|
| <b>Reformage CH<sub>4</sub></b> | Réacteurs catalytiques |
| <b>Synthèse Méthanol</b>        |                        |

**Besoin:** estimer la performance de l'ensemble du procédé de valorisation en faisant une comparaison de technologies en termes économiques (avec une précision de +/- 30 %) et de bilan carbone.

# Exemples d'application

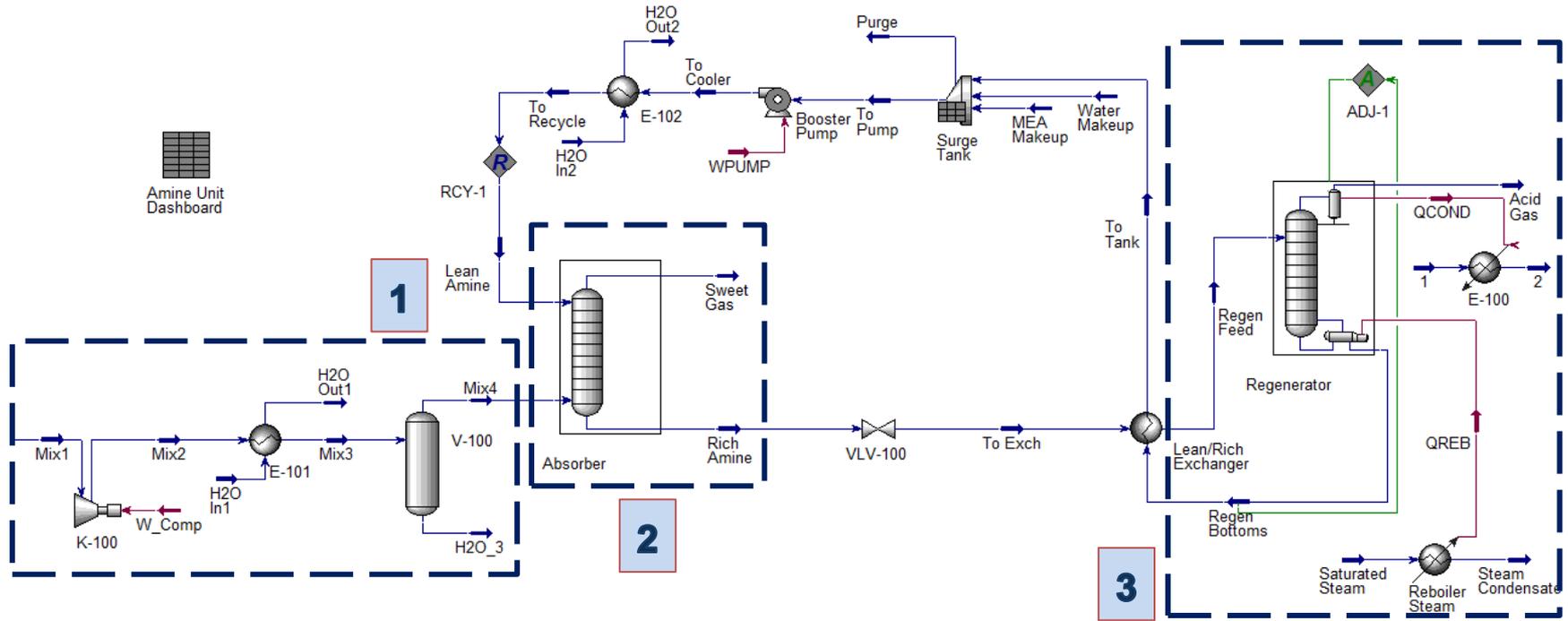
Les processus à une échelle donnée sont reliés à des propriétés et à un comportement à une échelle supérieure.



Charpentier, 2013

# Exemple de mise en œuvre

## Absorption chimique du CO<sub>2</sub>



**Difficulté majeure:** plusieurs paramètres et conditions opératoires à déterminer sur le modèle détaillé proposé sur Aspen Hysys pour chaque débit ou composition d'entrée à analyser → convergence difficile et temps de simulation important

# Exemple de mise en œuvre

## Absorption chimique du CO<sub>2</sub>

Estimation de paramètres de design

Variables d'entrée



Modèle statistique

Variables de sortie

$Q_G$

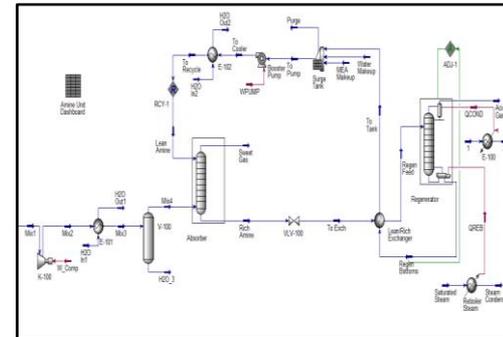
$$Q_{\text{solvant}} = 327 * Q_G * \frac{y_{\text{CO}_2}}{x_{\text{MEA}}}$$

$y_{\text{CO}_2}^{\text{in}}$

$$D_{\text{Abs}} = 10800 * \sqrt{\frac{Q_G}{\sqrt{P}}}$$

$P$

$$D_{\text{Reg}} = 160 * Q_{\text{solvant}}$$



$y_{\text{CO}_2}^{\text{out}}$

$Q_{\text{solvant}}$

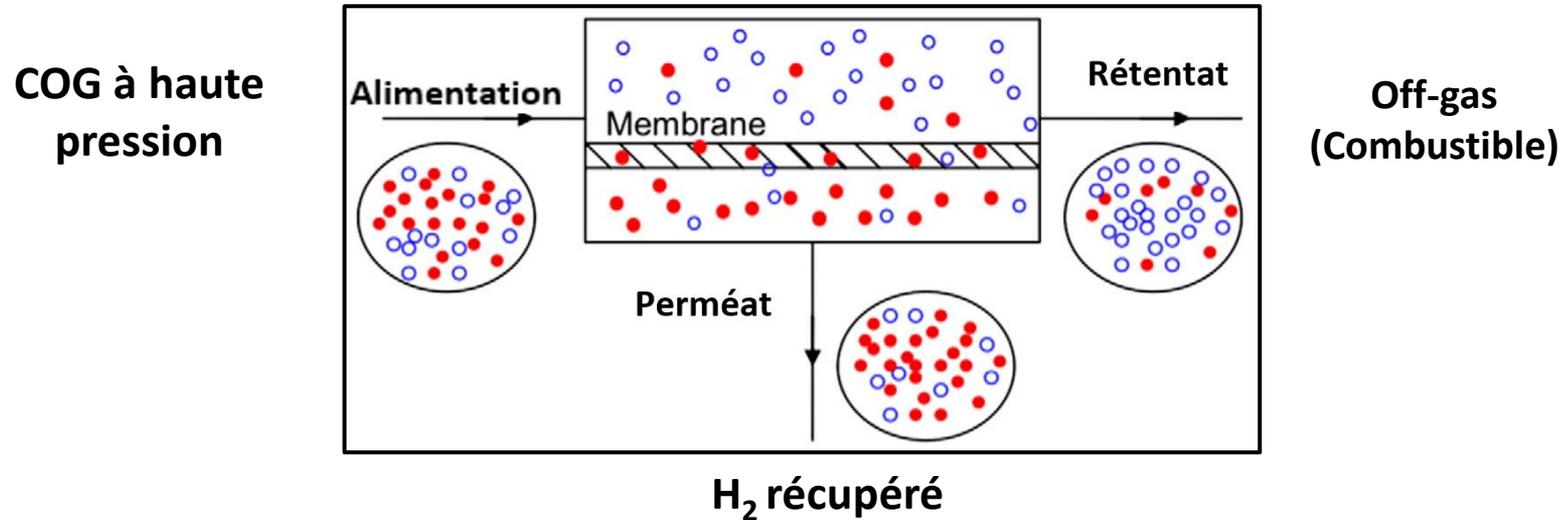
$D_{\text{Abs}}$

$D_{\text{Reg}}$

GPSA Engineering databook, 2004

# Exemple de mise en œuvre

## Séparation membranaire

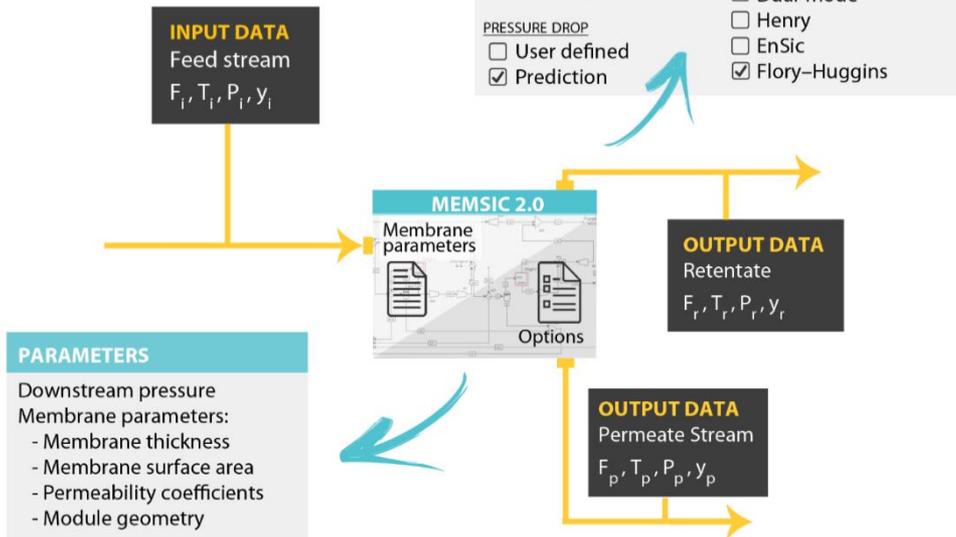


**Difficulté majeure:** Opération non incluse dans le simulateur utilisé ou le modèle proposé est très simplifié

# Exemple de mise en œuvre

## Séparation membranaire

- **MEMSIC**: Logiciel pour la modélisation de la séparation membranaire

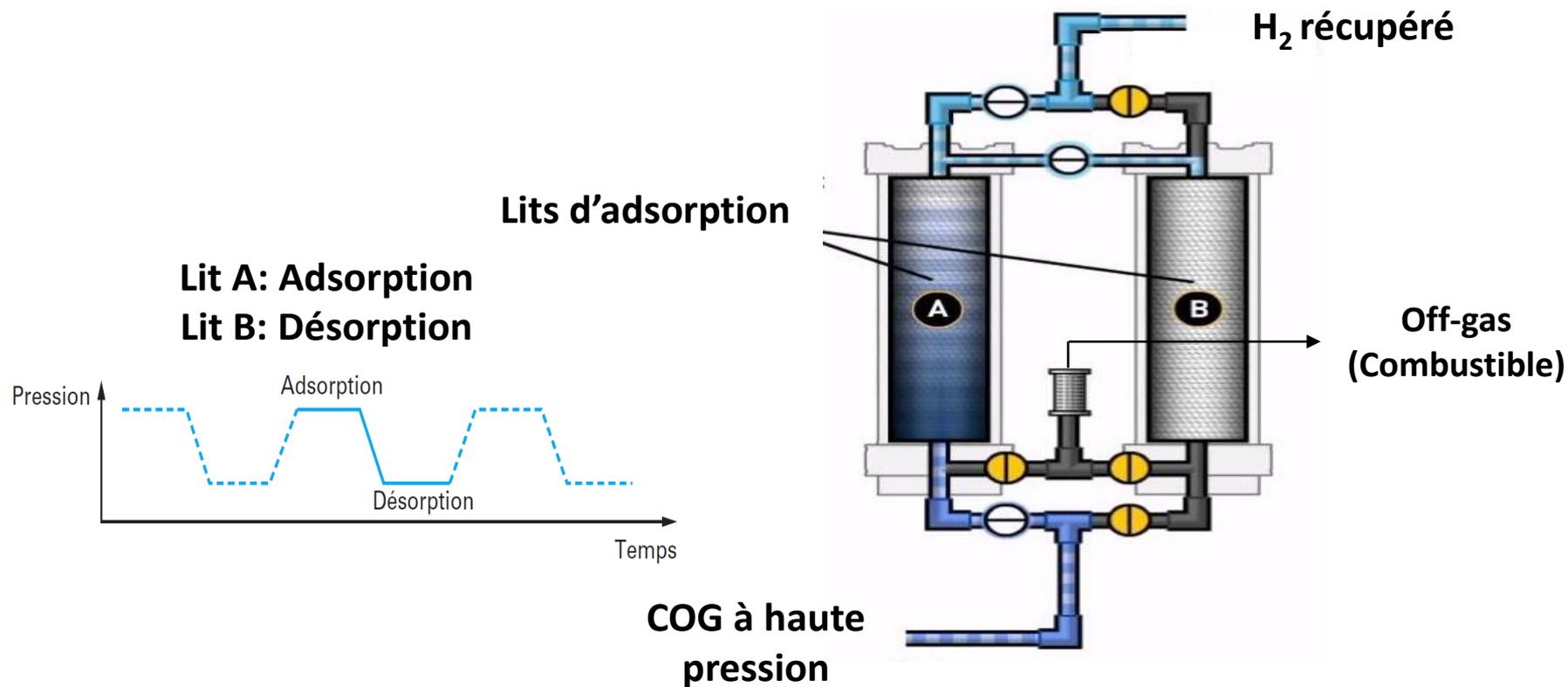


- Représentation fidèle du procédé
- Application du standard **CAPE-OPEN**, ce qui permet d'intégrer le module codé sur Fortran dans les différents logiciels de simulation

Bounaceur, Favre et al., 2016

# Exemple de choix d'un type de modèle

## Le PSA (Pressure Swing Adsorption)



**Difficulté majeure:** Opération dynamique et cyclique qu'il faut intégrer dans un procédé global en régime permanent

# Exemple de choix d'un type de modèle



## Le PSA (Pressure Swing Adsorption)

### Modèle détaillée

- Représentation fidèle
- Résolution d'un système d'EDP
- Temps de simulation important
- Construction d'un banc d'essai



### Scale-up

- Représentation fidèle
- Résolution d'un système d'équations algébriques non-linaires
- Temps de simulation court
- Construction d'un banc d'essai



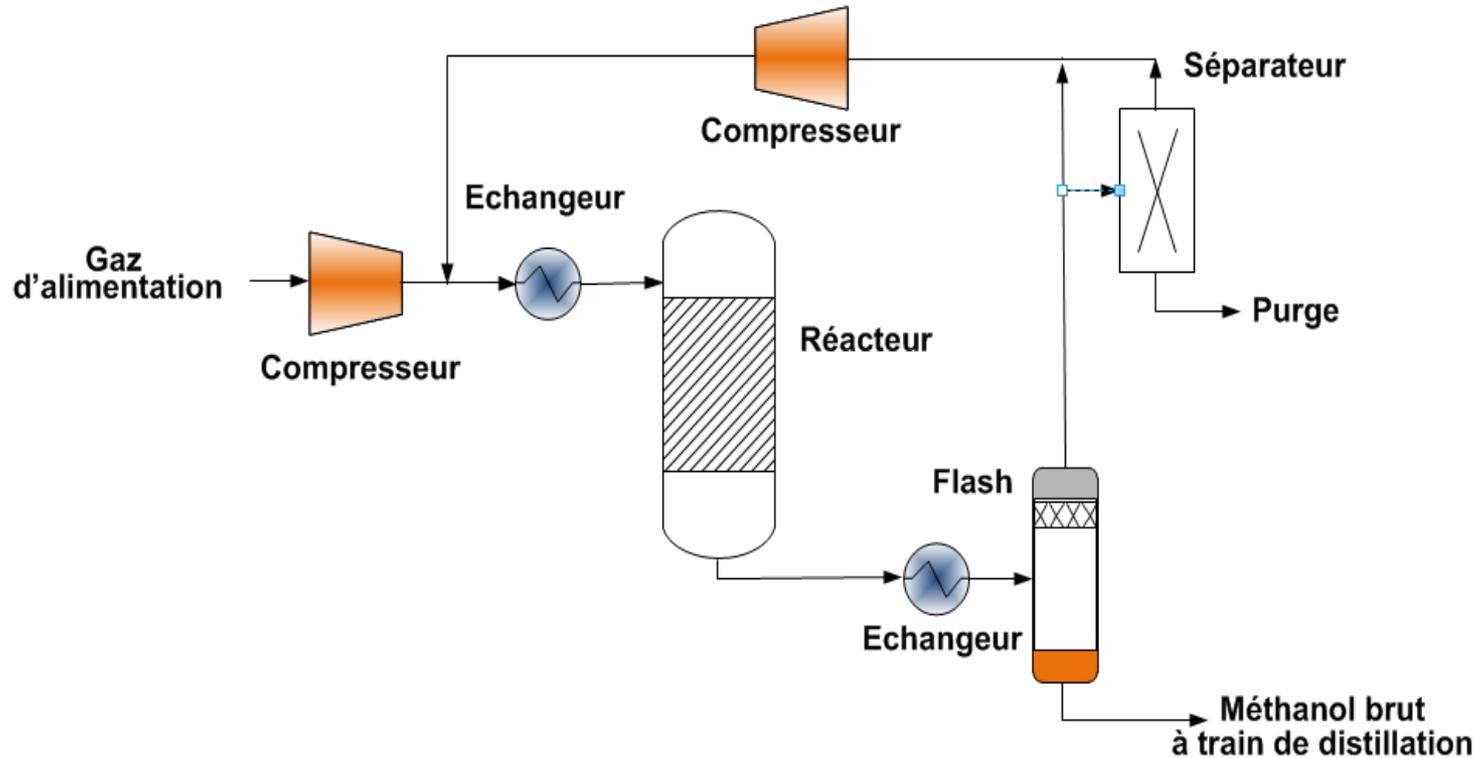
### Modèle simplifié

- Représentation approximative
- Inclusion possible de paramètres d'efficacité → ajustement du modèle.
- Résolution d'un système d'équations algébriques non-linaire (approche à l'équilibre)
- Temps de simulation court



# Exemple de choix d'un type de modèle

## Boucle de synthèse de méthanol



**Difficulté majeure:** Réacteur catalytique avec transfert de matière et de chaleur

# Exemple de choix d'un type de modèle



## Boucle de synthèse de méthanol

### Modèle hétérogène

#### Bilan de matière phase fluide

$$-\left(\frac{\partial(uC_i^f)}{\partial z} - D_{ax,i} \frac{\partial^2 C_i^f}{\partial z^2}\right) = \frac{k_{d,i} a_{sf}}{\varepsilon} (C_i^f - C_i^{su})$$

#### Bilan de matière phase solide

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( D_{eff,i} S_x \frac{\partial C_i^s}{\partial x} \right) dx + \sum_j \nu_{i,j} \hat{r}_j \rho^s dV^s = 0$$

#### Bilan de chaleur

$$\pi d_t N_t U (T - T_c^{vap}) = \Omega \frac{\partial}{\partial z} \left( \sum_i u C_i^f C_{p,i} T \right) + Q$$

- Représentation fidèle
- Résolution d'un système d'EDP
- Temps de simulation important



### Modèle simplifié

- Réacteur catalytique → réacteur à l'équilibre thermodynamique

$$M_{catalyseur} = \frac{\dot{Q}_{massique}}{VVH}$$

VVH: Vitesse Volumique Horaire

- Représentation très approximative
- Modèle inclus dans le simulateur
- Temps de simulation court



### Modèle pseudo-homogène

#### Bilan de matière

$$\frac{\partial F_i}{\partial z} = \frac{\pi}{4} d_t^2 \sum_j \nu_{i,j} r_j$$

#### Bilan de chaleur

$$\frac{\partial T}{\partial z} = \frac{\pi d_t U (T_{paroi} - T) - \frac{\pi}{4} d_t^2 \sum_j \Delta H_{r,j} r_j}{\sum_i F_i C_{p,i}}$$

- Représentation approximative
- Paramètres d'efficacité → ajustement du modèle
- Modèle inclus dans le simulateur
- Temps de simulation court

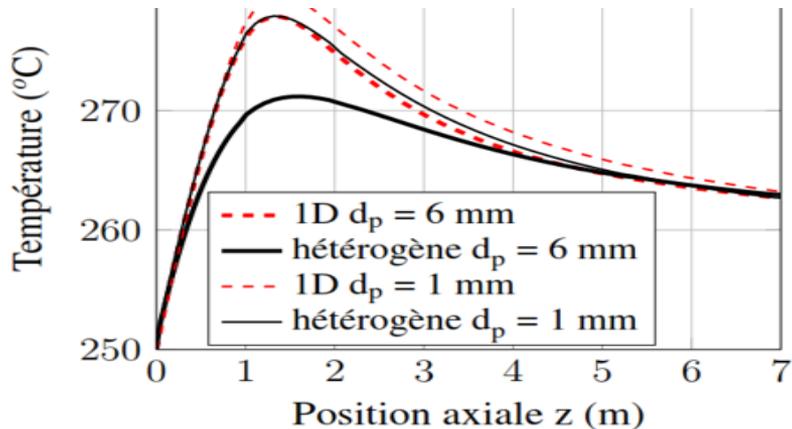
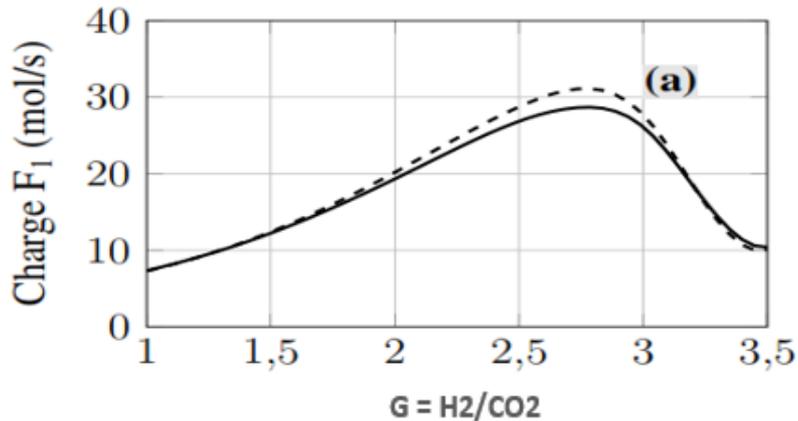


# Exemple de choix d'un type de modèle

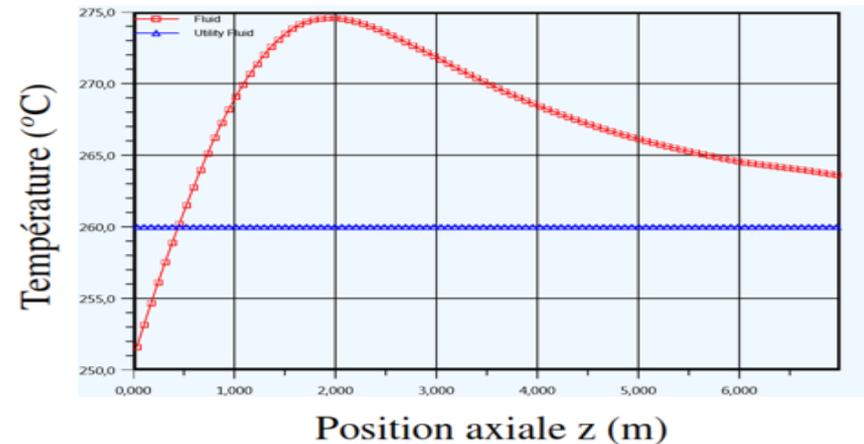
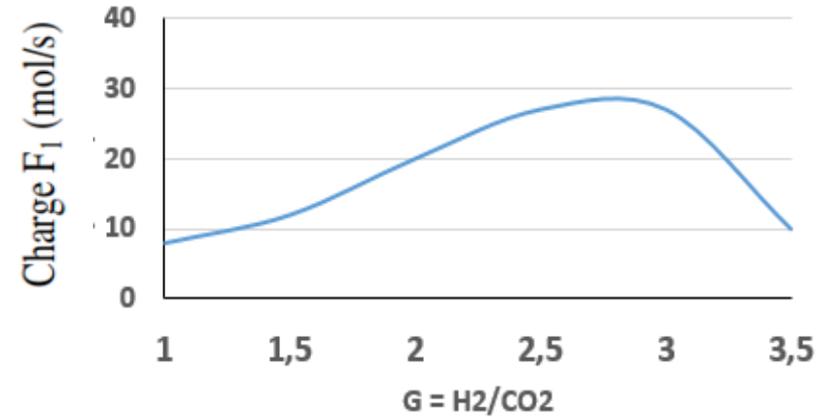


## Boucle de synthèse de méthanol

### Modèle hétérogène



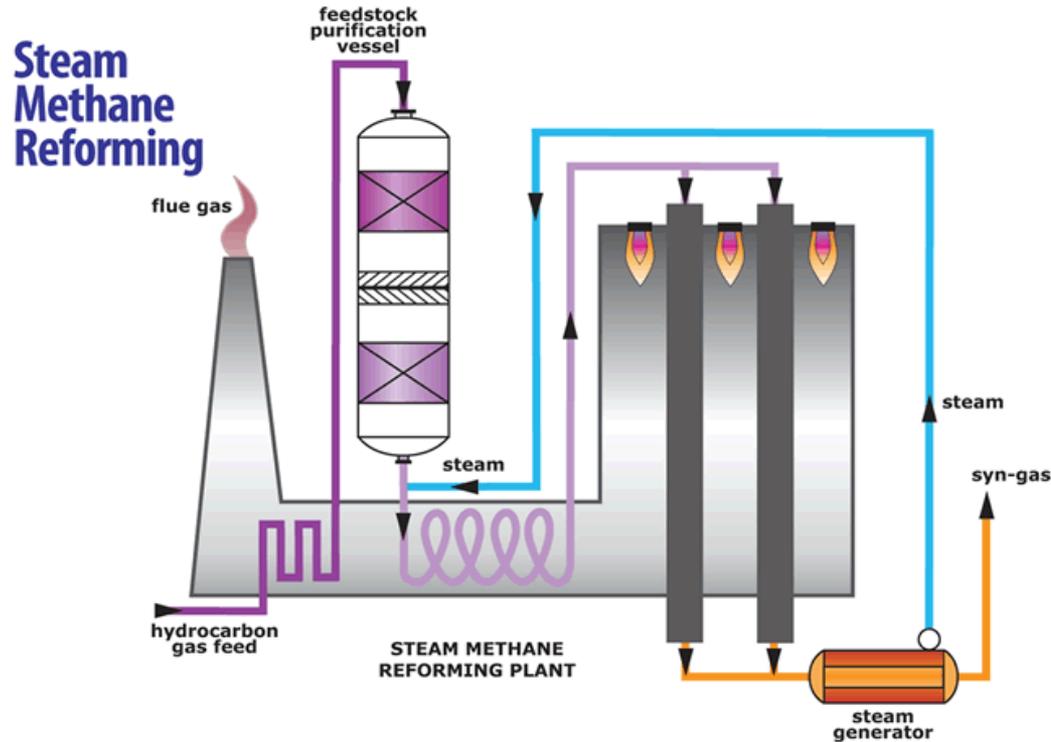
### Modèle pseudo-homogène



S. Arab, 2014

# Exemple de développement

## Vaporeformage du CH<sub>4</sub>



**Difficulté majeure:** Réacteur catalytique avec transfert de matière et de chaleur (four)

# Exemple de développement

## Vaporeformage du CH<sub>4</sub>

- Analogie du réacteur de synthèse de méthanol

### Bilan de matière

$$\frac{\partial F_i}{\partial z} = \frac{\pi}{4} d_t^2 \sum_j \nu_{i,j} r_j$$

### Bilan de chaleur

$$\frac{\partial T}{\partial z} = \frac{\pi d_t U (T_{paroi} - T) - \frac{\pi}{4} d_t^2 \sum_j \Delta H_{r,j} r_j}{\sum_i F_i C_{p,i}}$$

↑  
four

- Phénomène limitant? → **Transfert de chaleur**

$$N_{tubes} = \frac{\sum_j \Delta H_{r,j} r_j}{q * \pi * D * L}$$

q: flux de chaleur par unité de surface

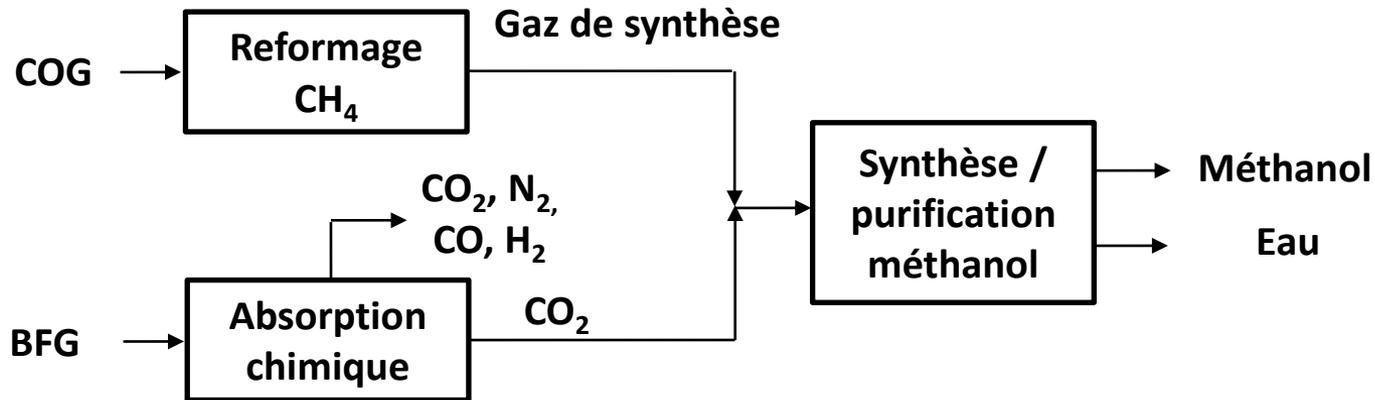
D: diamètre tube

L: longueur tube

Rase, 1977

- La composition à la sortie du réacteur est obtenue en utilisant un réacteur à l'équilibre thermodynamique

# Conclusion



- La modélisation de chaque unité puis la simulation de l'ensemble du procédé a permis d'établir le meilleur schéma selon l'analyse de faisabilité (technico-économique et bilan carbone)
- L'approche phénoménologique fine (et coûteuse) n'est pas toujours nécessaire. Il faut mieux commencer par le modèle le plus simple, puis augmenter la complexité seulement si nécessaire. L'approche optimale doit souvent marier l'approche analytique et l'approche empirique

# Merci

Merci de votre attention...

...et merci à mes collègues et encadrants pour leurs contributions :

Jean-François PORTHA, Laurent Falk, Diego-Javier GOMEZ OCHOA, Cristian-Camilo RUIZ, Laura-Patricia ARENAS-NAVAS, Alvaro-Andres RAMIREZ, Sofiane ARAB.

Wilmar URIBE-SOTO

CNRS-LRGP

[wilmar.uribe-soto@univ-lorraine.fr](mailto:wilmar.uribe-soto@univ-lorraine.fr)

Nancy, le 9 novembre 2017, Journée J3P,

« Approches de modélisation à différentes échelles : de leur développement à leur application »

