Polycopie de Travaux Pratiques

Simulation et Conception des Procédés Industriels

Mme BENYAHIA KHADIDJA

2025-2026

Préambule

Les travaux pratiques présentés dans ce polycopié ont été conçus dans le but d'accompagner les futurs ingénieurs dans la maîtrise des outils de simulation et de conception des procédés industriels. Destiné à un public déjà familiarisé avec les principes fondamentaux des procédés industriels, ce manuel se veut à la fois un guide méthodologique et un support d'auto-apprentissage.

Fruit de plusieurs années d'expérience d'enseignement du module de *Simulation et Conception des Procédés* à l'École Nationale Polytechnique d'Oran (ENPO), ce document met l'accent sur l'approche pratique et l'application directe des concepts théoriques à travers des études de cas réelles et des scénarios industriels représentatifs. L'objectif est de permettre à l'étudiant non seulement de manipuler les logiciels spécialisés (tels qu'Aspen Hysys, Aspen Plus, etc.), mais également de développer un esprit critique dans l'analyse, l'optimisation et la validation des procédés simulés.

En espérant que ce travail constituera un outil efficace pour renforcer l'autonomie, la rigueur et la compétence technique des apprenants, nous invitons les utilisateurs de ce manuel à l'exploiter pleinement et à en faire un véritable compagnon tout au long de leur parcours d'ingénieur.

Sommaire

1. TP1 : Prise en main des simulateurs Aspen plus et Aspen HYSYS
   Création d'une simulation, sélection des composés et modèles thermodynamiques
2. TP2 : Simulation des propriétés physiques et utilisation des paquets thermodynamiques
3. TP3 : Diagrammes d'équilibre liquide-vapeur (T-X-Y / P-X-Y)
4. TP4 : Simulation et dimensionnement d'un échangeur de chaleur
5. TP5 : Opérations unitaires de séparation : Flash isotherme liquide-vapeur
6. TP N°6 : Production de gaz de synthèse

Introduction

Les travaux pratiques présentés dans ce polycopié s'inscrivent dans le cadre de l'enseignement du module Simulation et Conception des Procédés Industriels. Ils ont pour objectif d'initier l'étudiant aux outils numériques utilisés dans l'ingénierie des procédés, tels que Aspen plus et Aspen HYSYS, largement employés dans les secteurs du raffinage, de la pétrochimie, de l'agroalimentaire et du traitement des effluents.

À travers une série d'exercices progressifs, l'étudiant sera amené à :

- Créer et configurer une simulation de procédé (choix des composés, modèle thermodynamique, unités de mesure) ;
- Interpréter et analyser les résultats obtenus, en confrontant les calculs numériques aux lois fondamentales de la thermodynamique ;
- Appliquer les concepts de dimensionnement, notamment pour les échangeurs de chaleur et les opérations de séparation ;
- Résoudre des cas concrets industriels, tels que le flash, les bilans matière et énergie ou le calcul des équilibres liquide-vapeur.

Ce recueil a été conçu pour favoriser l'autonomie, la rigueur scientifique et le raisonnement critique.

TP1 – Prise en main des simulateurs Aspen HYSYS

Création d'une simulation, sélection des composés et modèles thermodynamiques

---

Objectifs du TP

- Découvrir l'interface de simulateur Aspen HYSYS
- Créer une nouvelle simulation
- Sélectionner les composés **et** modèles thermodynamiques
- Construire un diagramme de procédé (PFD)
- Spécifier les courants de matière et d'énergie
- Lancer le calcul et interpréter les résultats

Tableau 1 : Étapes simplifiées d'utilisation (méthode générale)

Étape	Action à réaliser	Description
1	Choix des composés	Sélectionner les composants dans la bibliothèque (ex : C1, C2, eau, etc.)
2	Sélection du modèle thermodynamique	Ex : Peng-Robinson pour hydrocarbures, NRTL/UNIQUAC pour mélanges non idéaux
3	Construction du PFD	Glisser-déposer les unités (échangeur, séparateur, etc.)
4	Ajout des courants de matière et d'énergie	Renommer les flux (ex : *Alimentation*, *Produit*, *Q-Chauffage*)
5	Spécification des conditions opératoires	Débits, température, pression
6	Exécution de la simulation	Bouton *Solver Active* (lumière verte)
7	Analyse des résultats	Onglet *Workbook* pour afficher les propriétés calculées

Tableau 2 : Choix du modèle thermodynamique – Guide rapide

Type de mélange	Modèle recommandé	Catégorie
Gaz légers / hydrocarbures	Peng-Robinson (PR) ou Soave-Redlich-Kwong (SRK)	Équation d'état (EOS)
Solutions non idéales (ex : eau + éthanol)	NRTL ou UNIQUAC	Modèles à coefficient d'activité
Mélanges simples	Loi d'Antoine (gaz parfait)	Cas simplifié

Conseils de bonne pratique

Toujours **renommer clairement les courants et unités**
Vérifier les unités de mesure (SI ou US) avant de commencer
Si la simulation ne converge pas → vérifier les **spécifications minimales requises**
Pour un échangeur, il faut **au moins 1 courant matière + 1 courant énergie**

TP2 – Simulation des propriétés physiques et utilisation des modèles thermodynamiques

---

Objectifs du TP

- Manipuler les paquets thermodynamiques (Property Packages)
- Calculer des propriétés physiques de mélanges
- Comparer les résultats entre différents modèles d'équilibre

---

Exercice 1 – Initialisation d'un mélange hydrocarboné

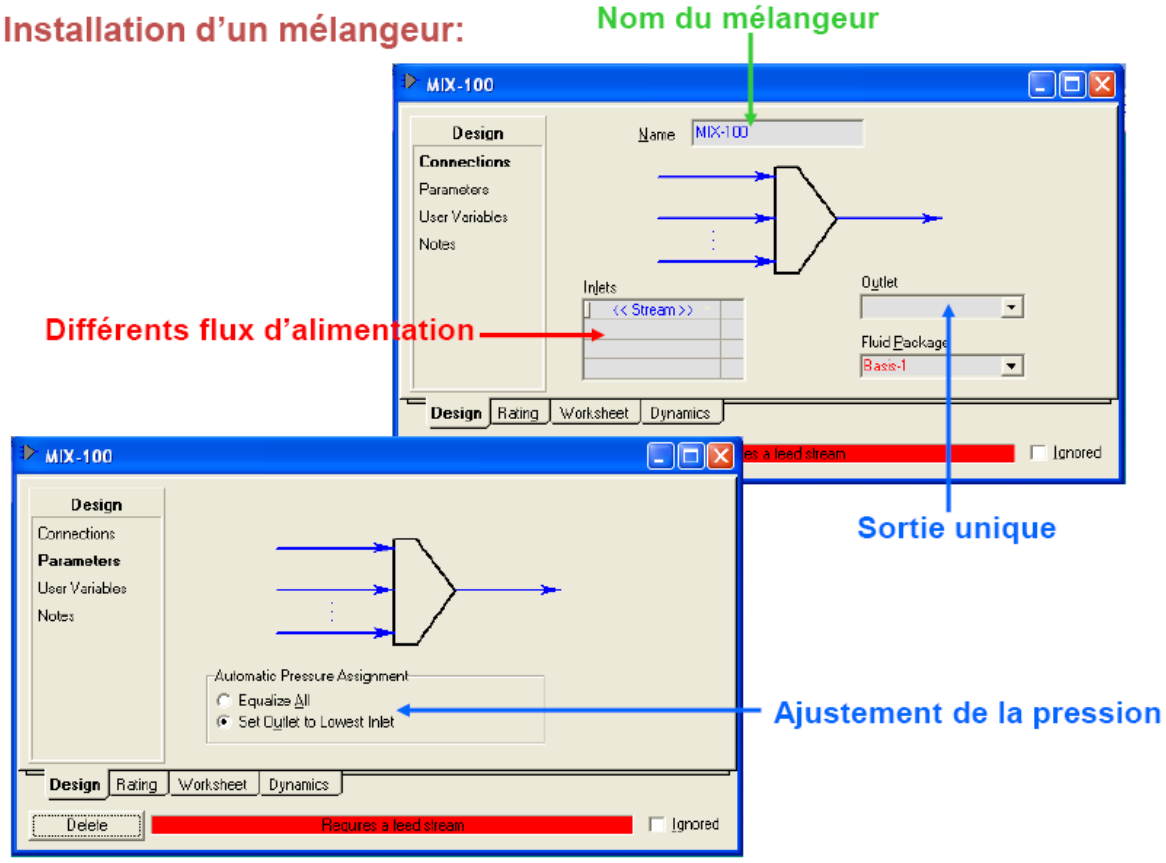

Tableau 1 :Données du mélange

Données du mélange	
Modèle thermodynamique	Peng-Robinson (PR)
Composants	C1, C2, C3, i-C4, n-C4, i-C5, n-C5, n-C6, n-C7, n-C8

Tableau 2 : *caractéristiques des deux flux (Feed 1 & Feed 2)*

Paramètre	Feed 1	Feed 2
Température (°C)	10	-20
Pression (kPa)	**4100**	**4100 (4000)**
Débit (kgmole/hr)	35	2
C1	0.19	0.25
C2	0.15	0.21
C3	0.10	0.15
i-C4	0.10	0.11
n-C4	0.11	0.13
i-C5	0.08	0.03
n-C5	0.09	0.07
n-C6	0.09	0.02
n-C7	0.05	0.005
n-C8	0.04	0.005

Tâche : Simuler le courant d'alimentation et **déterminer les propriétés de sortie** (pression, température, débit massique, fraction molaire vapeur/liquide…).

Exercice 2 – Compléter le tableau des propriétés physiques en utilisant le programme de flowsheeting (Choisir le système d'unité SI).

Tableau 2 : les propriétés physiques

Propriétés	Cyclohexane	Isopropanol
Poids moléculaire (Molecular Weight)		
Volume critique (Critical Volume)		
Facteur de compressibilité critique (Critical Compressibility Factor)		
Moment dipolaire (Dipole Moment)		
Enthalpie libre (Gibbs) de formation (Gibbs Energy of Formation)		
Température normale d'ébullition (Normal Boiling Point)		
Température critique (Critical Temperature)		
Pression critique (Critical Pressure)		
Facteur acentrique (Acentric Factor)		
Point de fusion normal (Normal Melting Point)		

Utiliser **le même mélange que l'exercice 1** – changer seulement **la température ou la pression** pour observer l'effet.

Exercice 3 – Étude d'un équilibre liquide/vapeur (L-V)

On considère l'équilibre liquide vapeur isobare du système Méthanol / (MTBE) à la pression de 101.33 kPa. On propose l'utilisation de la méthode de Wilson.

Questions :

1️⃣ Pour **x = 0,6 en Méthanol**, déterminer **l'intervalle de température** du domaine biphasique :

```
T_bulle < T < T_point de rosée
```

2️⃣ À **T = 326 K**, déterminer **l'intervalle de compositions** pour lequel le système est **biphasique**

TP3 – Diagrammes d'équilibre liquide-vapeur (T-X-Y / P-X-Y)

Objectif du TP

- Tracer un **diagramme d'équilibre liquide-vapeur (ELV)**
- Comprendre la **relation entre composition, température et pression**
- Comparer les résultats selon le **modèle thermodynamique choisi**

Tracer le diagramme d'équilibre liquide/vapeur T–X–Y du système **Toluène / Benzène** à **12 bars**, en utilisant le **modèle Peng-Robinson (PR)**.

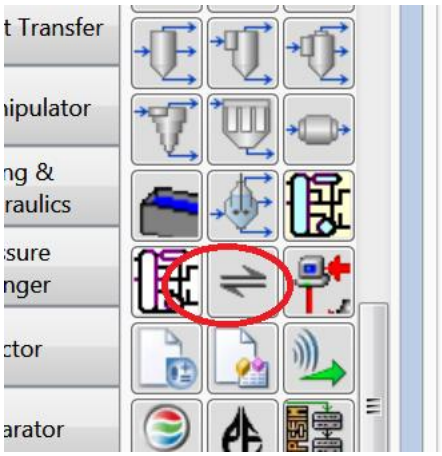

Tableau 1 : Méthodologie recommandée

Étape	Action à réaliser
1	Créer un nouveau cas de simulation
2	Sélectionner les **composants : Benzène (C6H6) et Toluène (C7H8)**
3	Choisir le **modèle thermodynamique : Peng-Robinson (PR)**
4	Accéder au module **"Property Package → Phase Envelope"**
5	Choisir le type de diagramme : **T-X-Y à pression constante**
6	Générer la **courbe d'ébullition (bubble point)** et la **courbe de rosée (dew point)**

Analyse attendue

- Quelle **zone correspond au liquide monophasique** ?
- Quelle **zone correspond à la vapeur pure** ?
- Où se trouve la **région biphasique liquide-vapeur** ?
- Le système **forme-t-il un azéotrope** ? *(Dans le cas Benzène/Toluène : non, système idéal)*

Comparer les résultats obtenus avec un autre modèle (ex : **Wilson** ou **NRTL**) pour montrer **l'impact du modèle thermodynamique** sur l'équilibre.

TP4 – Simulation et Dimensionnement d'un Échangeur de Chaleur

Objectifs du TP

- Simuler un **échangeur simple** dans un logiciel de procédés (HYSYS / Prosimplus)
- Calculer les **transferts thermiques** nécessaires
- Effectuer le **dimensionnement d'un échangeur tubulaire** selon la méthode **KERN**

Application 1 – Calcul du Volume Molaire d'un Mélange Eau/Éthanol

Détermination du volume molaire d'un mélange eau-éthanol. Soit un mélange éthanol-eau constitué de 50% molaire d'éthanol. - Déterminer le volume molaire à la pression atmosphérique et à 50°C d'une mole/h de ce mélange.

Tableau 1 : Détermination du volume molaire d'un mélange eau-éthanol

Mélange	**50 % molaire éthanol / 50 % eau**
Débit	1 mole/h
Conditions	T = 50°C, P = 1 atm

Application 2 – Simulation d'un échangeur simple

Objectif Refroidir le mélange précédent de 50°C à 10°C

Hypothèse $\Delta P = 0$ (pas de perte de charge)

Déterminer la **puissance thermique à soutirer (Q)**.

Formule rappel :$Q = \dot{m} \times Cp \times (T_{in} - T_{out})$

Tableau 2 :Application 3 – Dimensionnement d'un échangeur à calandre et tubes (Méthode KERN)

Élément	**Données disponibles**
Type d'échangeur	Tubes et calandre
Nombre de passes tubes	2
Nombre de passes calandre	2
Données thermiques	Débits, Cp, viscosité, conductivité, densité fournis dans l'énoncé
Objectif	Déterminer : Q, ΔTLM, Facteurs R et P, Surface A', Nombre de tubes, Coefficients U_fouling et U_propre, Pertes de charge

Tableau 3 : Étapes de calcul attendues

Étape	Calcul
1	Calcul de la puissance thermique Q
2	Calcul de l'écart logarithmique moyen de température (ΔTLM)
3	Détermination des facteurs de correction R et P
4	Calcul de la surface d'échange A'
5	Estimation du nombre de tubes N'T
6	Calcul des coefficients de transfert propre (Up) et encrassé (Us)
7	Calcul des pertes de charges côté tube et côté calandre

TP5 – Opérations Unitaires de Séparation : Flash Isotherme Liquide-Vapeur

---

Objectif du TP

- Simuler une **séparation par détente (Flash isotherme)** dans un ballon flash
- Déterminer les **fractions liquide et vapeur** ainsi que leur **composition à l'équilibre**

Énoncé

Un mélange liquide contenant **65 % en mole de benzène (1)** et **35 % de toluène (2)** s'écoule à **80 kmol/h**.
Il est **flashé** à travers une **vanne de détente**, puis envoyé dans un **ballon flash maintenu à 363 K et 1 bar**.

Tableau 1 : propriétés des composés Benzène et toluène

Composé	A_i	B_i	C_i	T_{min}[K]	T_{max}[K]
Benzène (1)	9.2806	2788.51	-52.36	280	377
Toluène (2)	9.3935	3096.52	-53.67	280	410

Déterminer :

1. Les **débits** du produit **vapeur** et **liquide**
2. Les **compositions molaire** des deux phases

Interprétation attendue

- La phase vapeur sera plus riche en benzène, car il est plus volatil
- La phase liquide sera plus riche en toluène, car il est moins volatil
- Le bilan matière doit vérifier :

  $F=V+L$ et $z_iF=y_iV+x_iL$

TP N°6 : Production de gaz de synthèse

Synoptique général de la fabrication du gaz de synthèse

Le processus de production de gaz de synthèse comporte plusieurs unités : réacteurs, refroidisseur et colonne d'absorption, permettant la conversion du méthane et la purification de l'hydrogène.

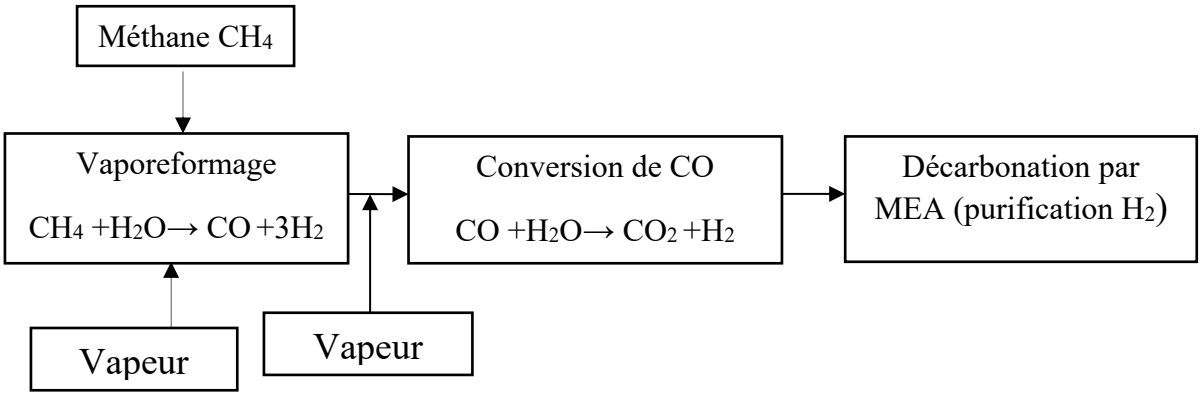

Figure 1 : Synoptique général de la fabrication du gaz de synthèse

Modèle thermodynamique

Le modèle **Peng-Robinson** est utilisé pour la simulation des réactions et l'équilibre des phases dans l'ensemble de l'unité.

Réacteur « Reformer » (Vaporeformage) – CRV-100

Le réacteur CRV-100 est un réacteur de conversion (Conversion Reactor) dans lequel la majorité du méthane réagit avec la vapeur d'eau pour produire de l'hydrogène (H_2) et du monoxyde de carbone (CO).

Spécifications principales :

tableau 1 : spécifications de méthane et l'eau dans le reformer

Stream Name	METHAN	Stream Name	WATER
Vapour / Phase Fraction	1,0000	Vapour / Phase Fraction	1,0000
Temperature [C]	25,00	Temperature [C]	25,00
Pressure [kPa]	200,0	Pressure [kPa]	200,0
Molar Flow [kgmole/h]	100,0	Molar Flow [kgmole/h]	260,0

Réacteur d'équilibre « Shift Reactor » – ERV-100

Le réacteur ERV-100 permet la conversion du monoxyde de carbone (CO) en dioxyde de carbone (CO_2)

Spécifications principales :

Tableau 2 : spécifications de shift réacteur

Stream Name	h2O
Vapour / Phase Fraction	1,0000
Temperature [C]	**200,0**
Pressure [kPa]	**200,0**
Molar Flow [kgmole/h]	**100,0**
Mass Flow [kg/h]	1802
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	1,805

Refroidisseur – E-100

Le refroidisseur E-100 a pour rôle de diminuer la température de l'effluent sortant du réacteur Shift ERV-100 de **254°C à 117°C** avant son entrée dans la colonne d'absorption.

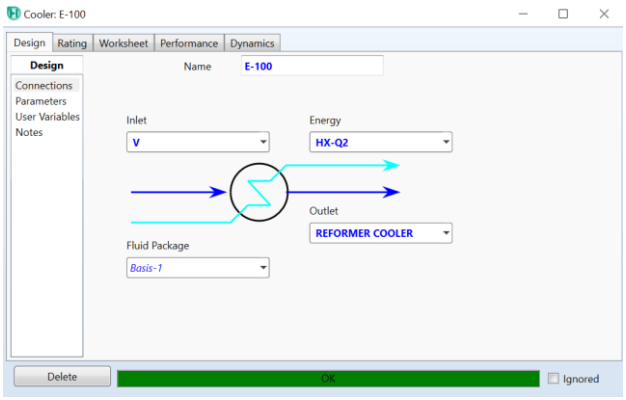

Figure 2 : refroidisseur E100

Colonne d'absorption – T-100

Dans cette colonne, le gaz synthèse brut (27 bars, 63°C) est traité pour extraire le dioxyde de carbone (CO_2) et une faible quantité résiduelle de monoxyde de carbone (CO), produisant ainsi un gaz riche en hydrogène purifié.

La colonne T-100 est garnie de **20 plateaux perforés**, assurant une absorption en **contre-courant** selon les réactions suivantes :

$$CO_2 + H_2O \longrightarrow HCO_3^- + H^+$$

$$2NH_2CH_2CH_2OH + HCO_3^- + H^+ \longrightarrow (HOCH_2CH_2NH_3)_2CO_3$$

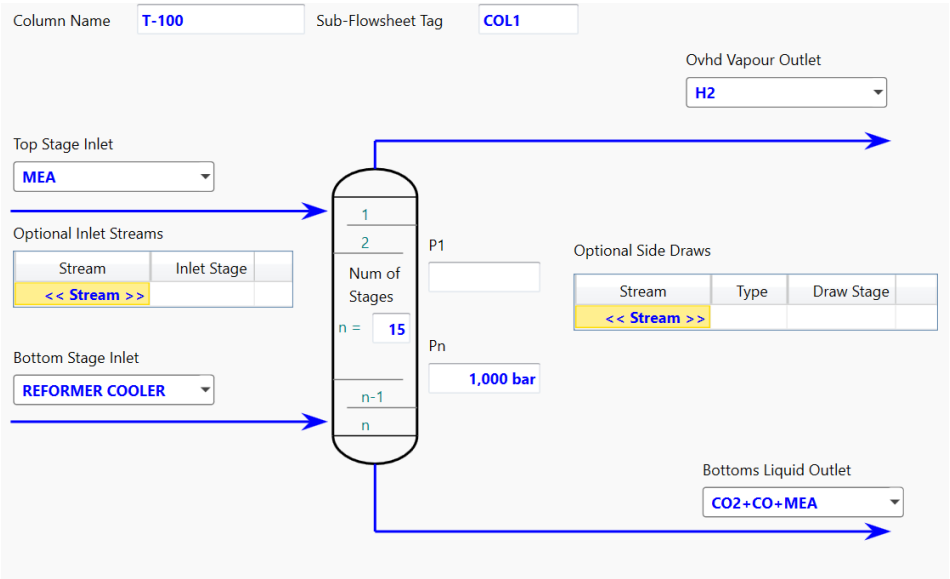

Figure 3 : Colonne d'absorption

Caractéristiques du produit purifié

Tableau 3 : Spécifications de l'hydrogène purifié sortant de la colonne

Paramètre	Valeur
Pression	… bar
Température	… °C
Débit volumique	… m³/h

Références bibliographiques

1. Smith, J. M., Van Ness, H. C., & Abbott, M. M. (2005). *Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics* (7e éd.). McGraw-Hill.
2. Çengel, Y. A., & Boles, M**.** (2015). *Thermodynamique – Une approche pragmatique* (8e éd.). McGraw-Hill.
3. Peng, D.-Y., & Robinson, D. B. (1976). A new two-constant equation of state. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 15(1), 59–64.
4. AspenTech**.** (2020). *Aspen HYSYS® Simulation Basis – User Guide*. Aspen Technology, Inc.
5. ProSim. (2021). *ProSimPlus – Manuel d'Utilisation*. ProSim S.A.
6. Hewitt, G. F., Shires, G. L., & Bott, T. R**.** (1994). *Process Heat Transfer*. CRC Press.
7. Kern, D. Q. (1950). *Process Heat Transfer*. McGraw-Hill.
8. McCabe, W. L., Smith, J. C., & Harriott, P. (2005). *Unit Operations of Chemical Engineering* (7e éd.). McGraw-Hill.
9. Smith, R. (2005). *Chemical Process Design and Integration*. Wiley.
10. Turton, R., Bailie, R. C., Whiting, W. B., & Shaeiwitz, J. A. (2012). *Analysis, Synthesis and Design of Chemical Processes* (4e éd.). Prentice Hall.
11. Kumar, A. et al. (2025). *Integrating coding platforms with process simulators for enhanced information flow between Python and Aspen HYSYS*.
12. Windyaningrum, A. S., Nurrahman, A., Pusparatu, et al. (2025). *Aspen HYSYS simulation for LPG production optimization in deethanizer column: case study in delayed coking unit*. *Scientific Contributions Oil & Gas, 48*(1), 193-205. DOI : 10.29017/SCOG.48.1.1738
13. Bhurse, T. (2025). *Simulation of Biodiesel from Waste Cooking Oil (WCO) in Aspen HYSYS and its Optimization Study*. Preprint.
14. Saputra, M. S. F., Azhar, R. F., & Ramadhani, T. (2025). *HYSYS Simulation of Chemical Process Equipment: Ethylene Dichloride production, optimisation énergétique et émissions*.
15. Mohamed Nasser Mohamed, N., Abdel El Moneim, N., & Ismail, I. (2025). *Using Aspen HYSYS software for the Simulation of Ammonia Production Plant*. *IJNRD*, 3(11).

Volume horaire :
Chaque TP est réalisé deux fois. Le volume horaire total consacré à ces travaux pratiques est de 24 heures, réparties sur 12 semaines, à raison d'une séance de 2 heures par semaine.

Titre du TP	VHH (h)	VHT	Nbr de semaines
TP N°1 : Débuter avec ProSimPlus / HYSYS	2	4	2
TP N°2 : Simulation des propriétés physiques	2	4	2
TP N°3 : Diagrammes d'équilibre liquide-vapeur	2	4	2
TP N°4 : Simulation et dimensionnement échangeur	2	4	2
TP N°5 : Flash isotherme liquide-vapeur	2	4	2
TP N°6 : Production de gaz de synthèse	2	4	2
Total		**24**	**12**