



République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université des Sciences et de la Technologie d'Oran Mohamed Boudiaf
Faculté de Chimie
Département de Génie Chimique



Examen de «CAO et Usine Virtuelle»

(L3-Péto)

A. Une base de données pour un logiciel de simulation de procédés chimiques est un endroit où nous stockons l'intégralité de données brutes ou d'informations nécessaires pour réaliser les tâches visées par l'utilisation du logiciel.

[1] quelle est la différence entre la base de données de corps purs et des binaires ? (5p)

base de données de corps purs	base de données des binaires
les propriétés physico-chimiques pour chaque espèce chimique et qui sont fixes (indépendante de la température) et les paramètres des corrélations pour le calcul des propriétés qui dépendent de la température.	capturent l'interaction entre deux composants chimiques ces paramètres sont utilisés pour le calcul des équilibres entre phase et des propriétés physico-chimiques des mélanges en utilisant les modèles thermodynamiques

[1] d'où viennent les résultats mentionnés dans la base de données des binaires ? (5p)

Dans la base de données des binaires, les interactions intermoléculaires sont présentées sous forme de paramètres qui capturent l'interaction entre deux composants chimiques dans le mélange. Ces paramètres sont des facteurs empiriques qui s'appuient dans leur détermination sur la disponibilité de données expérimentales. Les paramètres d'interaction binaires sont généralement ajustés à partir des données d'équilibres vapeur-liquide des systèmes binaires. Différentes fonctions objectives ont été proposées à cet effet, telles que la minimisation de la différence entre les températures d'ébullition expérimentales et les valeurs de températures d'ébullition calculées par différents modèles thermodynamiques, ou des compositions en phase vapeur pour des compositions liquides imposées. La DECHEMA est la principale source de paramètres d'interaction binaire, estimés à partir de données expérimentales d'équilibres entre phases.

B. Donnez un exemple de détermination du degré de liberté d'un module utilisé dans le simulateur Hysys ? (6p)

Pour un simple échangeur de chaleur

Le modèle mathématique comprend des bilans de matière et d'énergie ainsi que des calculs thermodynamiques de phase. Le bilan matière est très simple, et il est donné pour n constituant ; avec $F_{i,E}$ est le débit du constituant i entrant dans l'échangeur et $F_{i,S}$ est le débit du constituant i sortant de l'échangeur

$$F_{i,E} = F_{i,S}$$

$$\text{Avec } \sum_{i=1}^n x_{i,S} = 1$$



République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université des Sciences et de la Technologie d'Oran Mohamed Boudiaf
Faculté de Chimie
Département de Génie Chimique



Pour le bilan énergétique, si l'on considère qu'il n'y a pas de perte de chaleur ni de changement de phase, on peut écrire :

$$F_S H_S = F_E H_E + Q$$

$$\text{Avec : } H = (P, T, x_i)$$

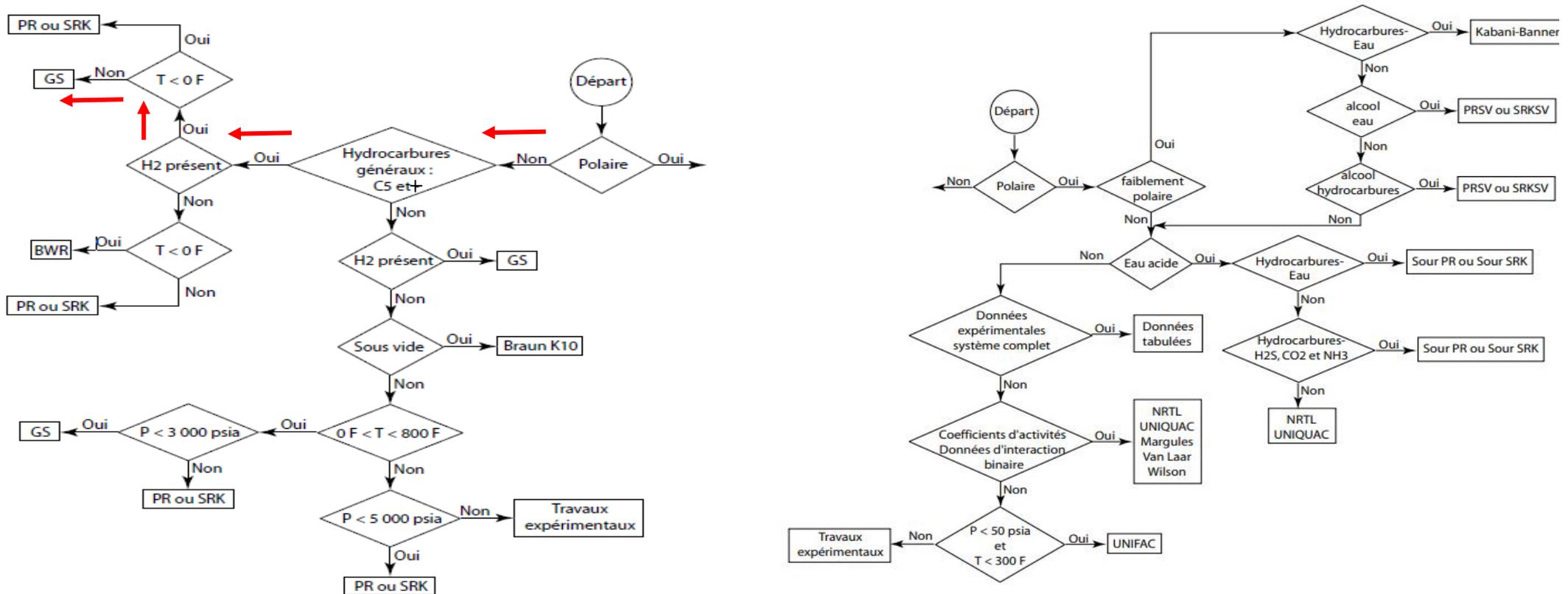
$$P_S = P_E - \Delta P$$

Avec : Q est la quantité de chaleur ajoutée ou soustraite du courant entrant dans l'échangeur, H est l'enthalpie et ΔP est la perte de charge.

Si le courant d'entrée (F_E) est complètement spécifié, les variables dans un échangeur de chaleur simple sont : la température (T_S) et la pression du flux de sortie (P_S), le débit du flux de sortie (F_S), n fractions partielles des composants du flux de sortie ($x_{i,S}$), la quantité de chaleur (Q) et est la perte de charge (ΔP).

Le degré de liberté est donné par $DOF = (n + 5) - (n + 3) = 2$

C. Vous voulez présenter au niveau du simulateur Hysys un mélange non polaire et qui contient du C_6H_{14} , C_7H_{16} , C_8H_{18} et H_2 . Si le mélange est sous une pression de 150 psia et une température qui varie entre 10 et 200°F, sélectionnez selon l'organigramme le modèle le mieux adapté à ce type de mélange (**Indiquez votre réponse avec des flèches sur l'organigramme**). (4p)



Réponse : Le modèle thermodynamique le mieux adapté à ce type de mélange est le modèle GS.



République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université des Sciences et de la Technologie d'Oran Mohamed Boudiaf
Faculté de Chimie
Département de Génie Chimique



Examen de CAO et Usine Virtuelles (L3-Péto)

Durée: 1h15

Note : /20

A. Une base de données pour un logiciel de simulation de procédés chimiques est un endroit où nous stockons l'intégralité de données brutes ou d'informations nécessaires pour réaliser les tâches visées par l'utilisation du logiciel.

[2] [1] quelle est la différence entre la base de données de corps purs et des binaires ? (5p)

base de données de corps purs	base de données des binaires
les propriétés physico-chimiques pour chaque espèce chimique et qui sont fixes (indépendante de la température) et les paramètres des corrélations pour le calcul des propriétés qui dépendent de la température.	capturent l'interaction entre deux composants chimiques ces paramètres sont utilisés pour le calcul des équilibres entre phase et des propriétés physico-chimiques des mélanges en utilisant les modèles thermodynamiques

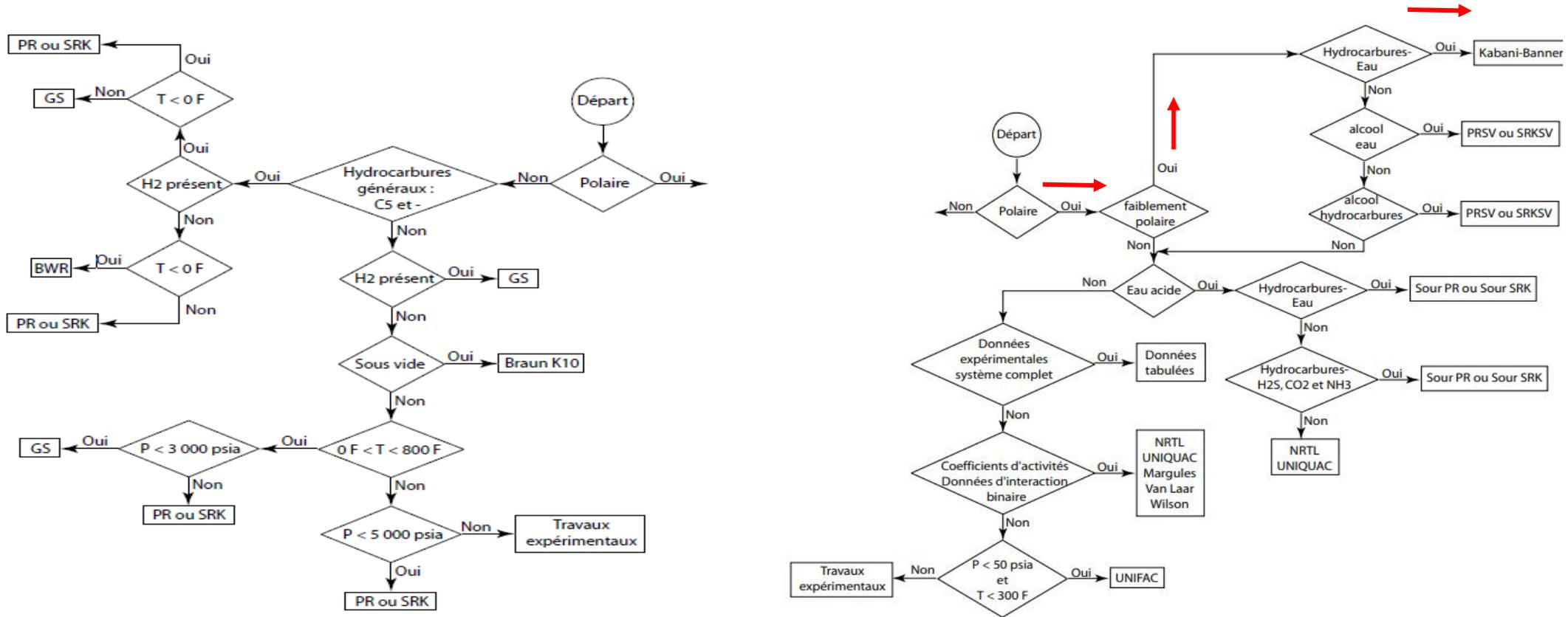
[2] d'où viennent les résultats mentionnés dans la base de données des corps purs? (5p)

La base de données des corps purs qui fait référence dans le domaine de la simulation des procédés est commercialisée par *DIPPR (Design Institute for Physical Property Data)*. *DIPPR* Database renferme les propriétés physico-chimiques des espèces chimiques et qui sont fixes (indépendante de la température) et les paramètres des corrélations pour le calcul des propriétés qui dépendent de la température. Ces données sont collectées à partir de nombreux manuels de données chimiques. Et qui sont des données réelles déterminées au niveau du laboratoire.

B. Selon cette figure, la méthode utilisée pour ajouter ce nouveau constituant à la base de données du simulateur est la méthode de contribution de groupe de UNIFAC. Le constituant sera ajouté à partir de sa formule chimique. À partir de cette fenêtre, nous pouvons construire une molécule basée sur des sous-groupes. (6P)

The screenshot shows the UNIFAC software interface. The 'UNIFAC Structure' panel has a table with columns 'Sub Group' and 'How Many', both containing '0'. There are buttons for '<... Add Group(s)' and 'Delete Group'. The 'Available UNIFAC Groups' panel has a table with columns 'Sub Group', 'Bonds', and 'Example Component'. The table lists groups 1 through 12, with group 1 (CH3) selected. Below the panels, there are sections for 'UNIFAC Structure' (showing '<<< No Structure Available >>>') and 'UNIFAC Calculated Base Properties' (Molecular Weight, UNIQUAC R, UNIQUAC Q) and 'UNIFAC Calculated Critical Properties' (Temperature [C], Pressure [kPa], Volume [m3/kgmole]), all showing '<empty>'.

C. Vous voulez présenter au niveau du simulateur Hysys un mélange à faible polarité et qui contient du C_5H_{12} , C_6H_{14} et H_2O . Si le mélange est sous une pression de 30 psia et une température qui varie entre 10 et 200 °F, sélectionnez selon l'organigramme le modèle le mieux adapté à ce type de mélange (**Indiquez votre réponse avec des flèches sur l'organigramme**). (4p)



Réponse : Le modèle thermodynamique le mieux adapté à ce type de mélange est le modèle de Kabani Banner.

