



Marie DEBACQ-LAPASSAT

Exemples d'usages et de besoins en calcul scientifique pour le génie des procédés

Plan de la présentation

le génie des procédés

- définition, industries, paradigmes & fondamentaux

un exemple de modèle d'un procédé : Fluranox

- contexte de l'étude & aspects généraux du modèle
- quelques points clés du modèle

modélisation et simulation en génie des procédés

- contexte, objectifs, types de logiciels
- types de modèles



Marie DEBACQ-LAPASSAT

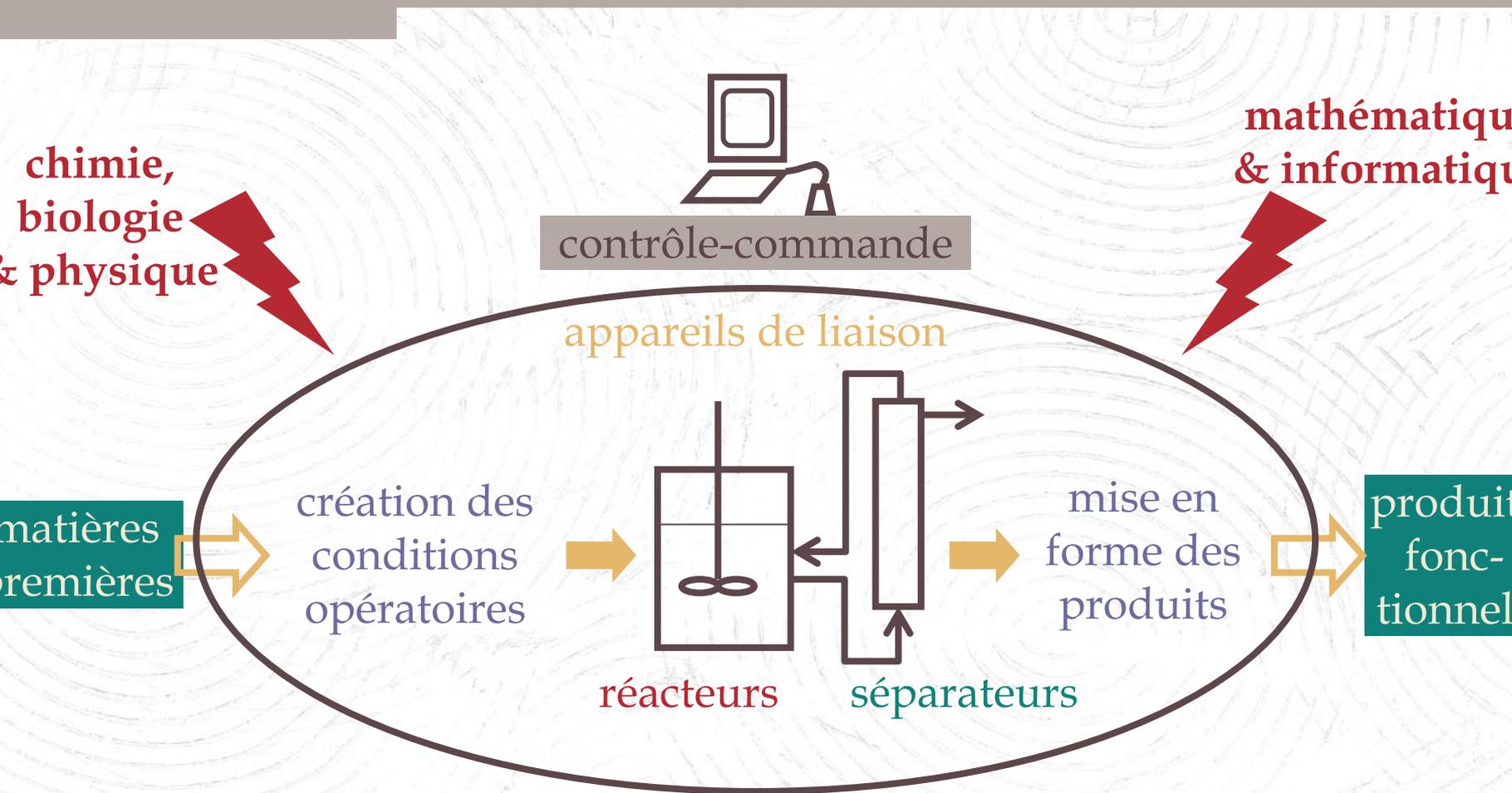
Exemples d'usages et de besoins
en calcul scientifique
pour le génie des procédés
le génie des procédés

Une définition

"Le Génie des procédés est l'ensemble des connaissances nécessaires à la conception, la mise en œuvre et l'optimisation de l'**appareillage** dans lequel on réalise la transformation physico-chimique et biologique des matières premières en produits fonctionnels **à l'échelle industrielle.**"



Sciences de base & Industries



↳ pétrochimie, métallurgique, polymères, agro-alimentaire, environnement, pharmacie, cosmétique, milieux naturels

Les fondamentaux (paradigmes)

concept d'opération unitaire

bilans de matière et d'énergie

hydrodynamique, phénomènes de transfert & cinétique chimique

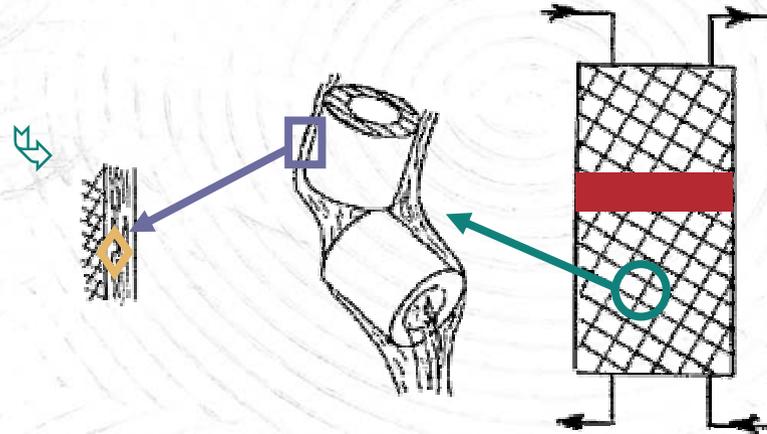
↪ notion de **couplage**

thermodynamique & cinétique

☞ étage théorique / unité de transfert

↪ méthodes de dimensionnement

multi-échelles



modélisations

interdisciplinarité

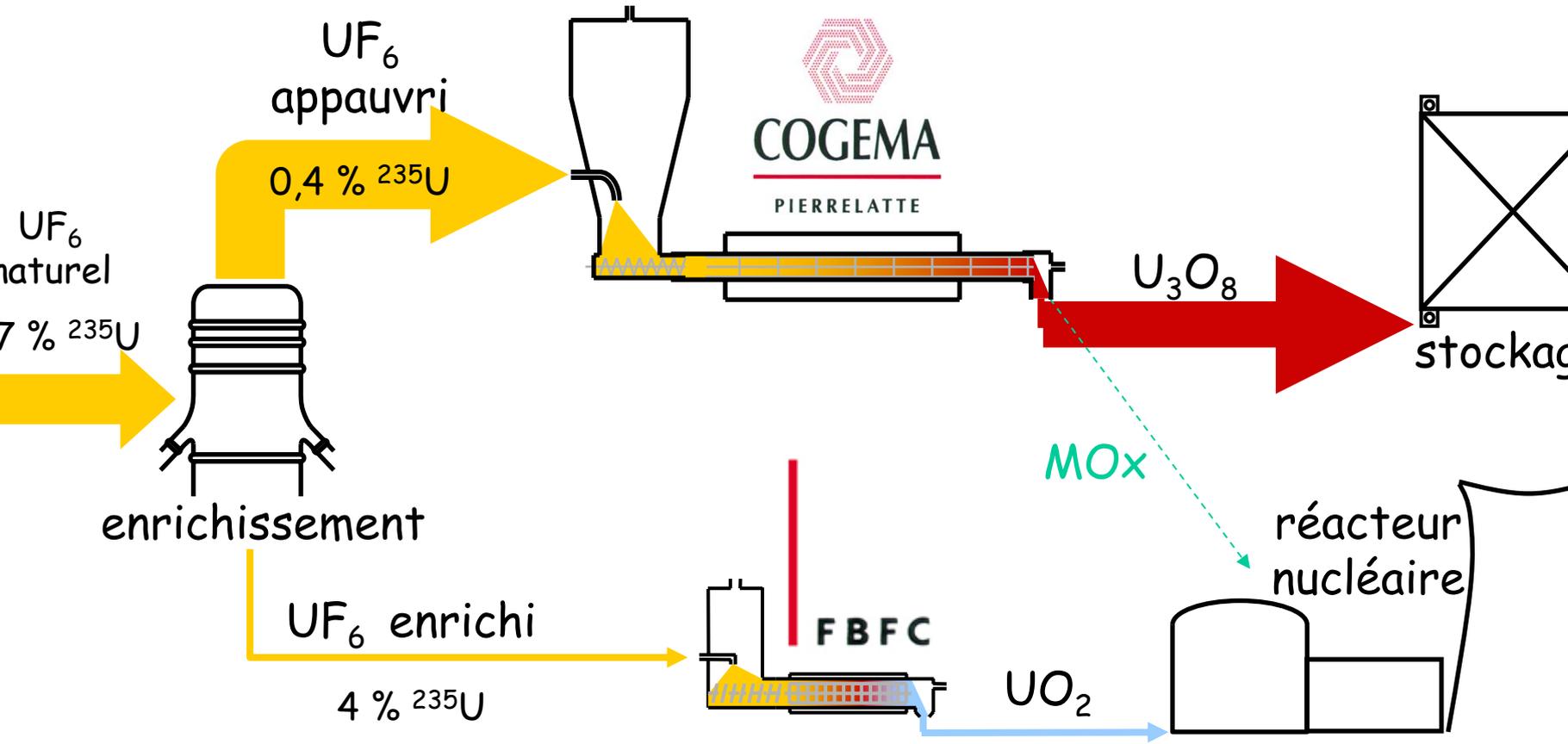


Marie DEBACQ-LAPASSAT

Exemples d'usages et de besoins en calcul scientifique pour le génie des procédés

un exemple de modèle d'un procédé : Fluranox

Au cours du cycle du combustible nucléaire ..



objectifs

▲ améliorer la connaissance, modéliser

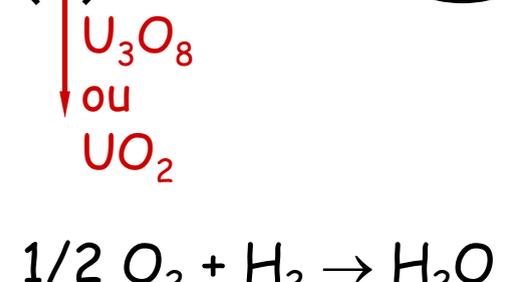
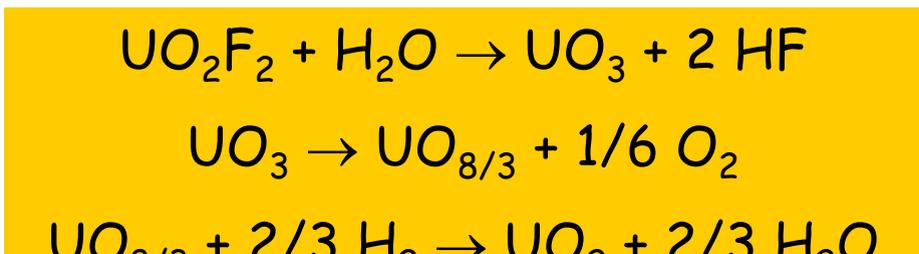
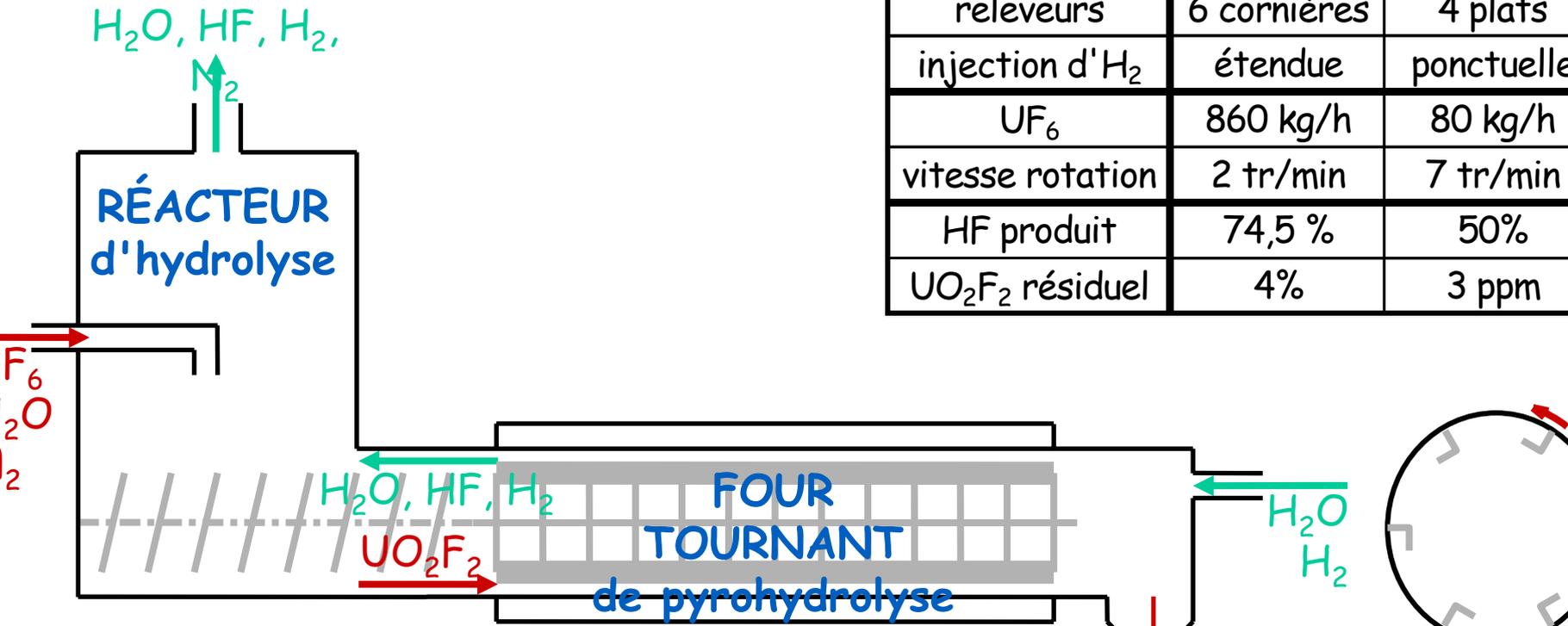
▲ objectifs exploitants



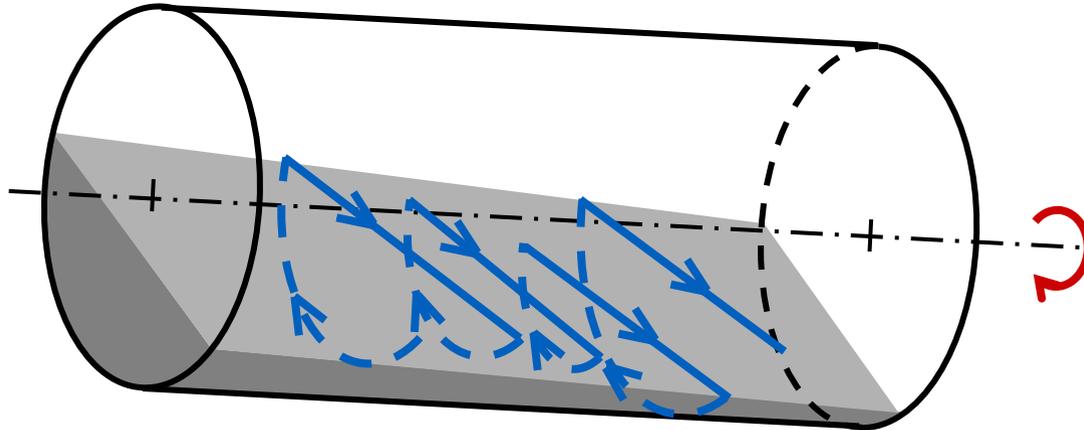
Les fours de conversion



	COGEMA	FBFC
diamètre	75 cm	35 cm
longueur	10 m	5 m
releveurs	6 cornières	4 plats
injection d'H ₂	étendue	ponctuelle
UF ₆	860 kg/h	80 kg/h
vitesse rotation	2 tr/min	7 tr/min
HF produit	74,5 %	50%
UO ₂ F ₂ résiduel	4%	3 ppm



Étude hydrodynamique



régime d'écoulement de la charge solide

☞ Distribution des Temps de Séjour

répartition de la poudre

☞ profil de chargement

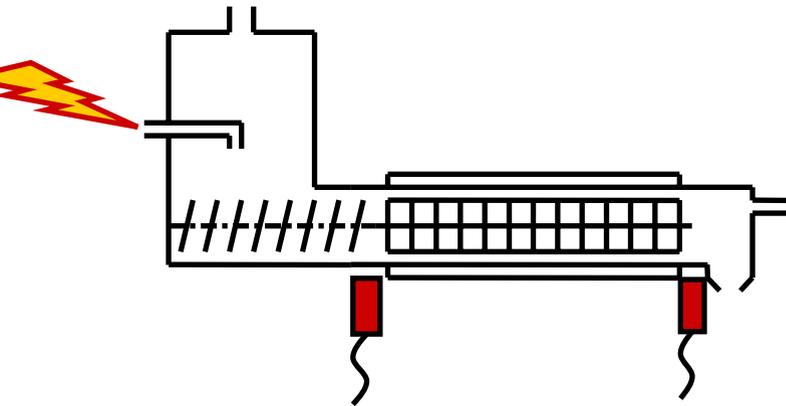
mouvement
axial

☞ répartition transversale de la poudre

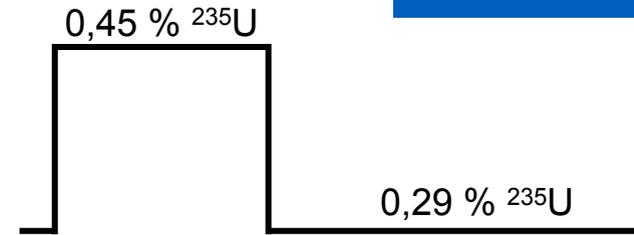
mouvement transversal

Distribution des Temps de Séjour

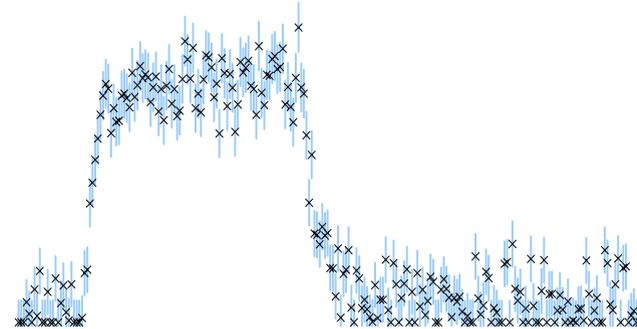
COGEMA



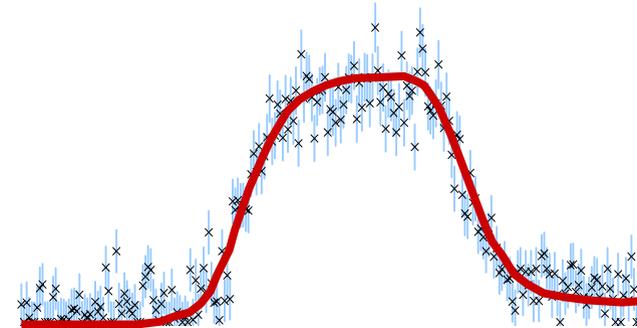
injection
 UF_6



entrée
four
tournant

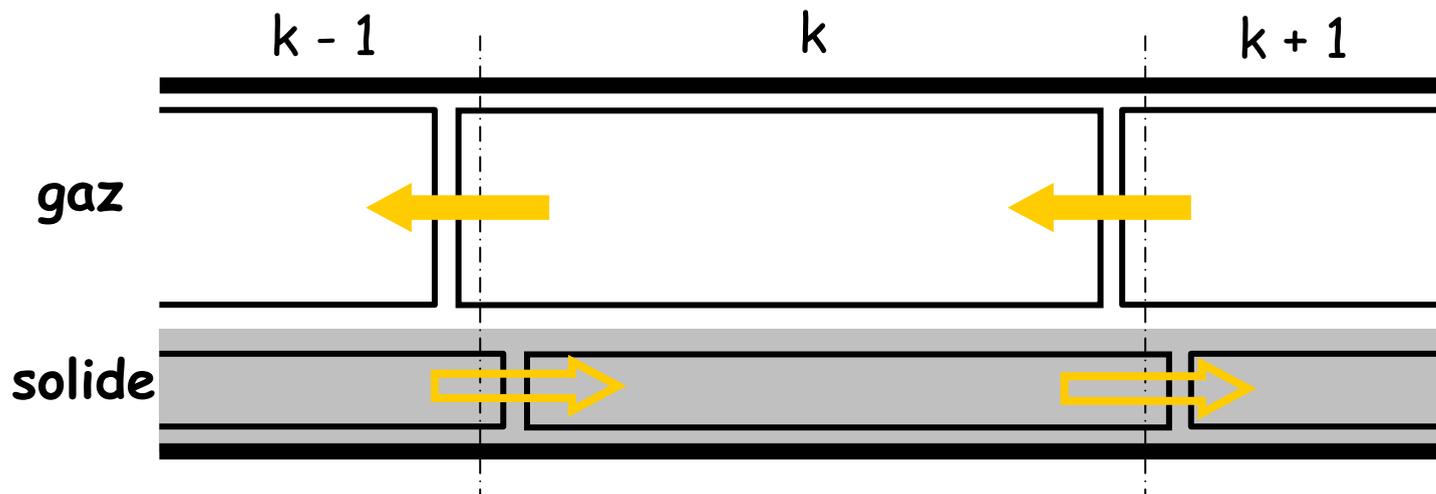


sortie
four
tournant

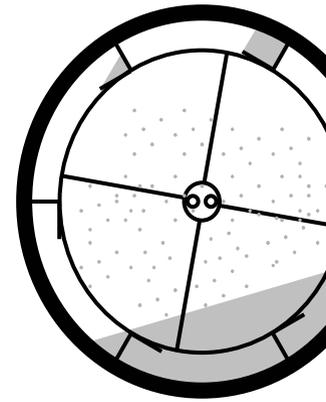


⇒ piston avec faible dispersion axiale

Discrétisation des fours



Profil de chargement



taux de remplissage [-]

0,4

0,2

0

$$\frac{dh}{dx} = \frac{\tan \alpha}{\cos \theta} - \frac{3 \cdot Q_v \cdot \tan \theta}{4\pi \cdot \omega \cdot R^3} \cdot \left[\frac{2 \cdot h}{R} - \left(\frac{h}{R} \right)^2 \right]^{-3/2}$$

Saeman-Kramers-Afacan

$\rho (U_3O_8) \approx 4 \times \rho (UO_2F_2)$

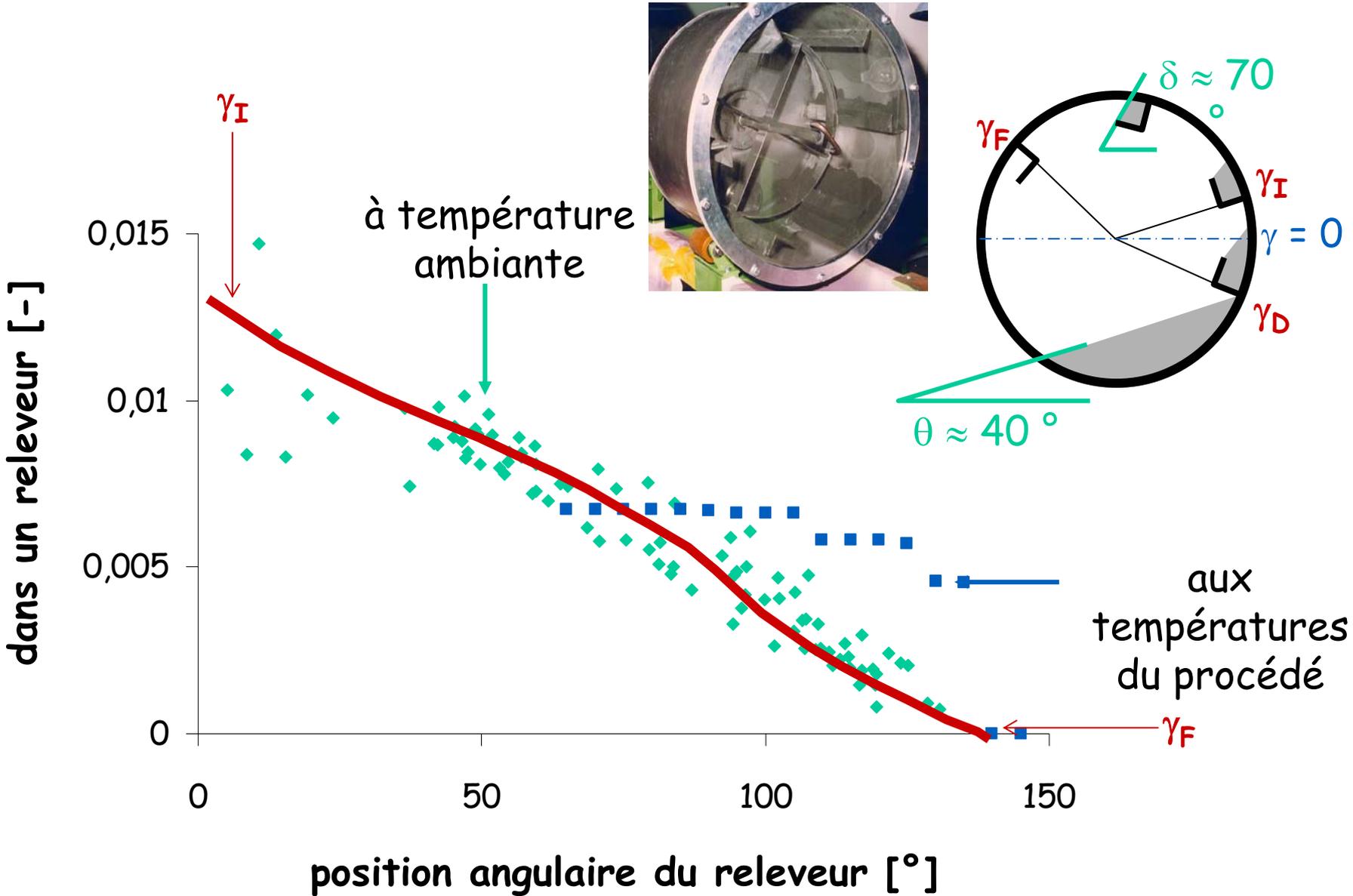
0

5

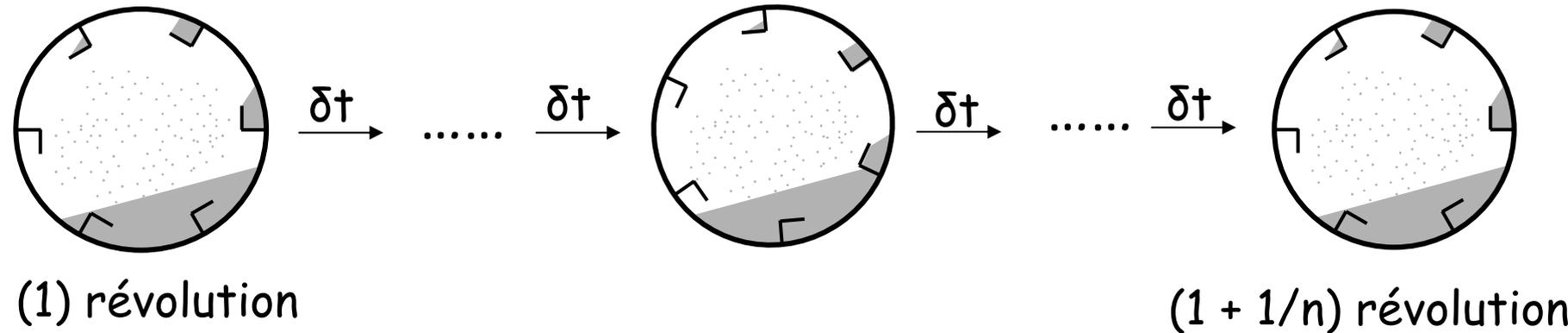
10

position axiale [m]

Lois de déchargement des releveurs



Fraction de poudre dans les releveurs

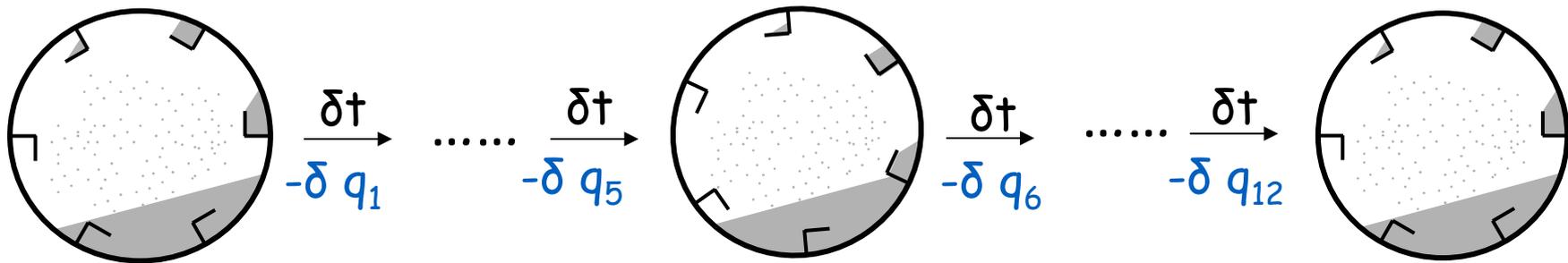


- mesurer les fractions de poudre à des instants donnés entre 1 et $(1 + 1/n)$ révolution
- calculer la fraction de poudre moyenne dans la tranche considérée
- retrouver l'angle correspondant (γ)



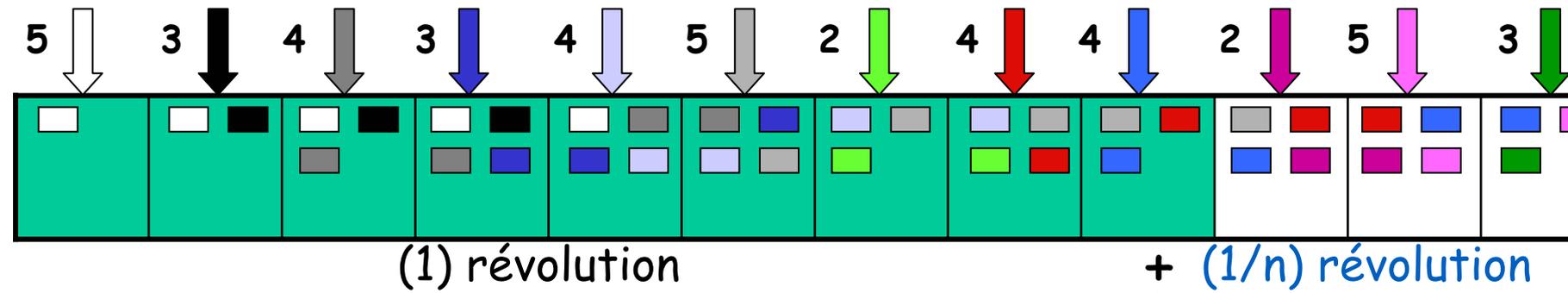
« Image » représentative de la tranche

Fraction de poudre dans le gaz



- on initialise le taux de remplissage
- à chaque pas de temps, on calcule la fraction δq_i détachée
- avec la hauteur de chute, la vitesse de chute, on en déduit le temps de chute « Case » représentative de la tranche

← moyenne

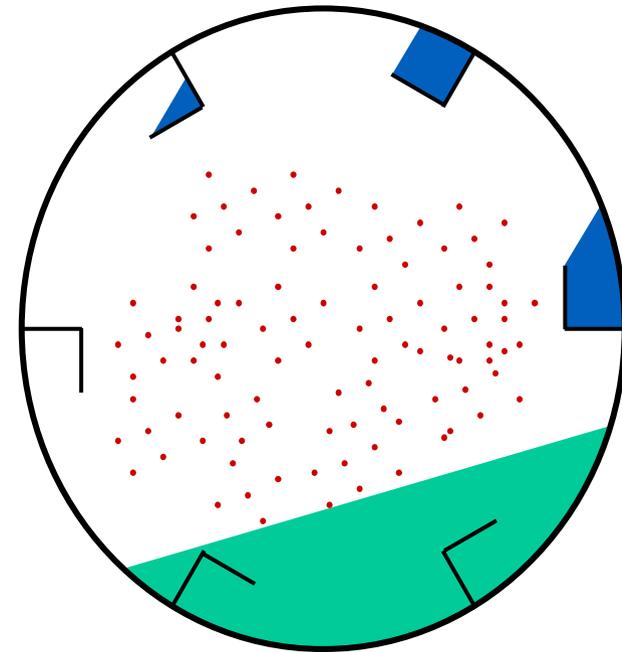
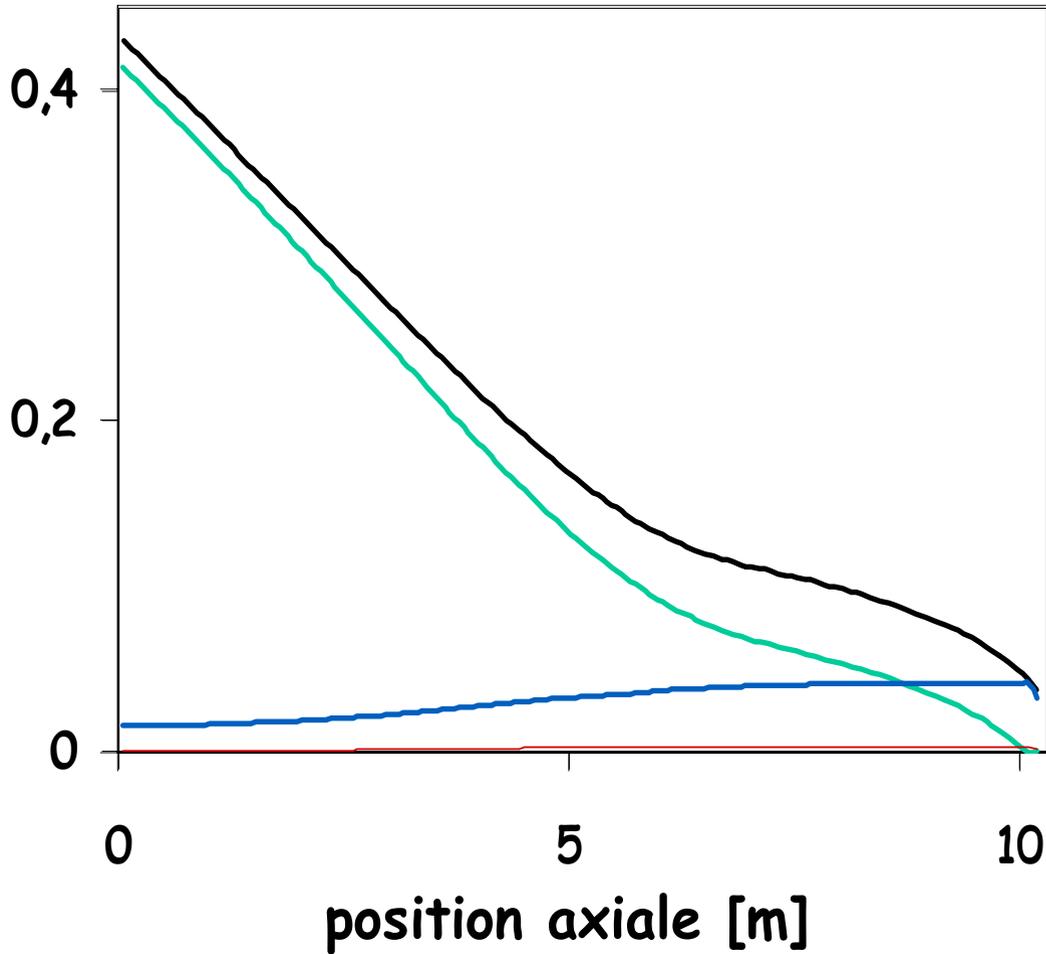


Modèle d'écoulement du solide

taux de remplissage [-]

profil de chargement axial

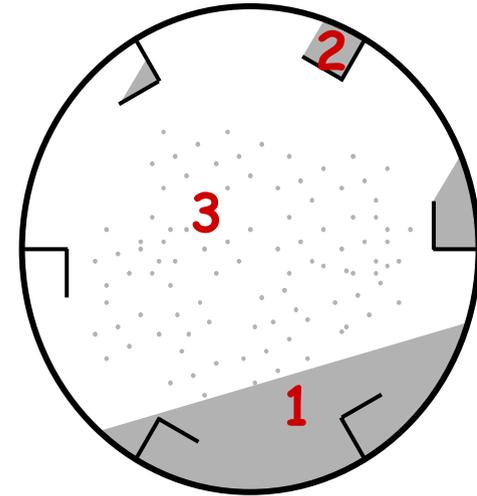
répartition transversale de la poudre



Principe du modèle chimique

3 zones réactionnelles

- ☞ zone 1, dans le fond du four
- ☞ zone 2, dans les releveurs
- ☞ zone 3, dans le gaz



⇒ transferts de matière
(transport externe, diffusion, réaction)

hypothèses

- ☞ $\text{UO}_2\text{F}_2 = \text{UO}_3$: renversible
- ☞ $\text{UO}_3 \rightarrow \text{U}_3\text{O}_8$: décomposition thermique
- ☞ zone 3 : régime chimique

Équations du modèle chimique

zone i, réaction (j)

loi des temps
caractéristiques additif

$$\frac{dX_{ij}}{dt} = \frac{1}{t_{extij} + t_{difij} \cdot f(X_{ij}, \text{géométrie}) + t_{chim,j}}$$

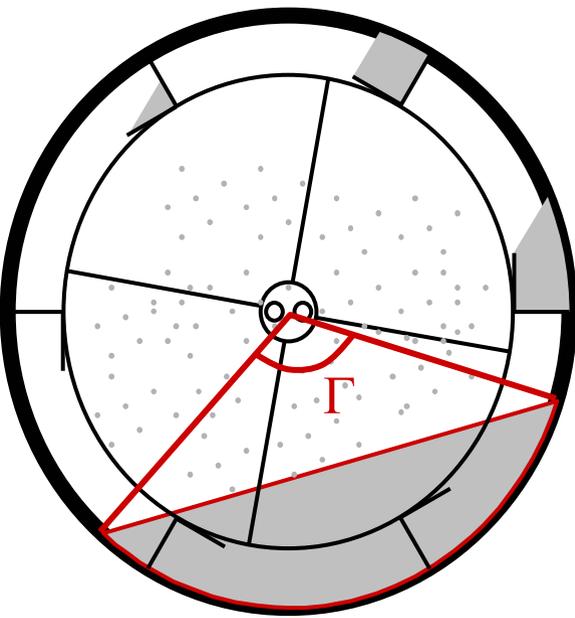
k_G → t_{extij}

D ou t_{mel} → t_{difij}

cinétique formelle
expérimentale → $t_{chim,j}$

$$\frac{dX}{dt} = A \cdot \exp\left(-\frac{Ea}{R \cdot T}\right) \cdot y_A^n \cdot [1 + a \cdot y_B]$$

Dans le fond du four (zone de poudre 1, réaction 1)



$$t_{\text{dif int } 1} = \frac{\rho_{\text{UO}_2\text{F}_2}}{M_{\text{UO}_2\text{F}_2}} \cdot \frac{R^2}{8 \cdot D \cdot C_t} \cdot \frac{\frac{\Gamma^2}{2} + \cos \Gamma - 1}{\ln \left(\frac{1 + y_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{gaz}}}{1 + y_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{eq}}} \right)}$$

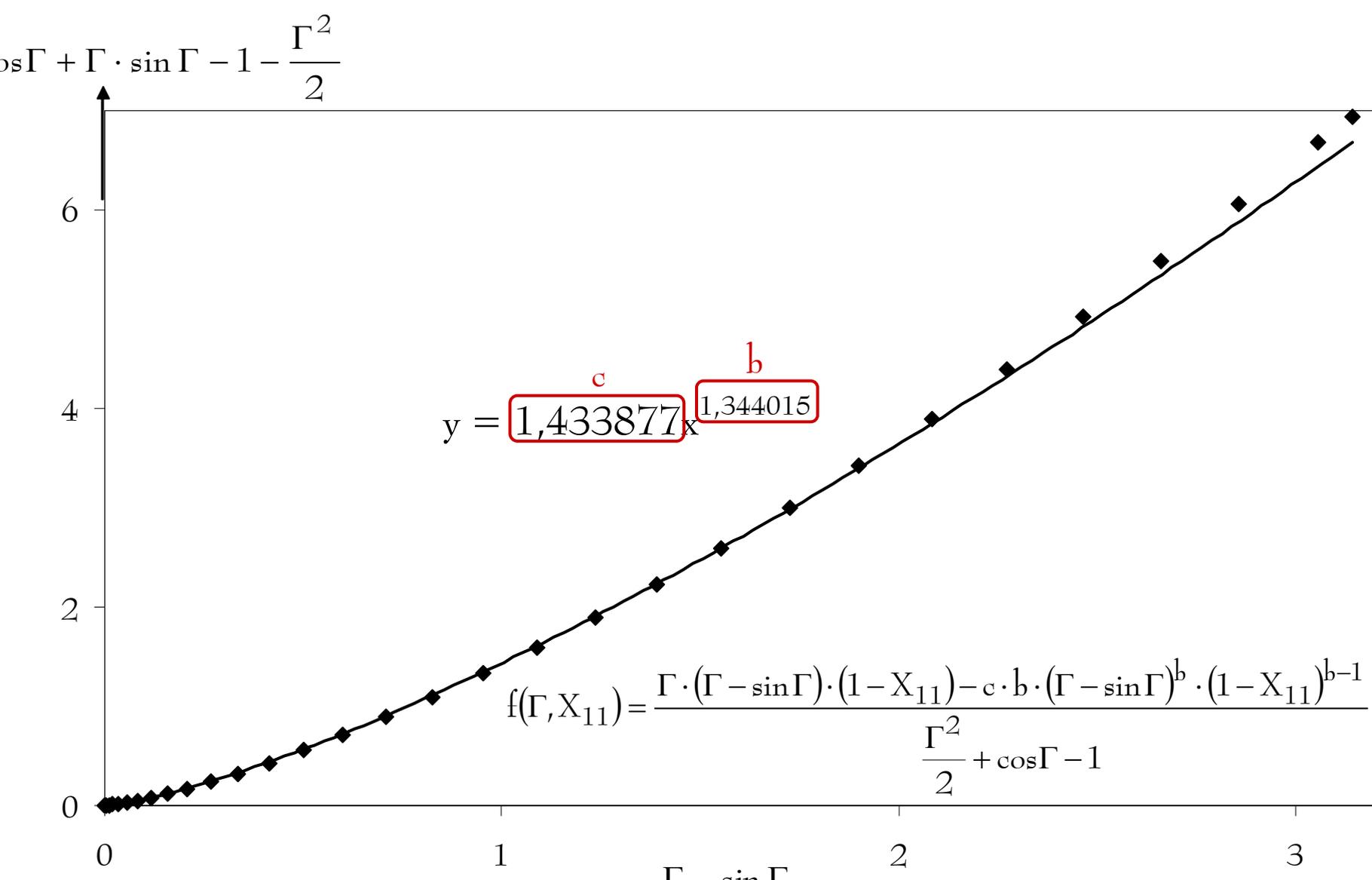
$$t_{\text{trans ext } 1} = \frac{\rho_{\text{UO}_2\text{F}_2}}{M_{\text{UO}_2\text{F}_2}} \cdot \frac{R}{4 \cdot k_D \cdot C_t} \cdot \frac{1 + y_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{eq}}}{y_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{gaz}} - y_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{eq}}} \cdot \frac{\Gamma - \sin \frac{\Gamma}{2}}{\sin \frac{\Gamma}{2}}$$

$$t_{\text{chim } 1} = \frac{1}{k' \left(y_{\text{H}_2\text{O}}^n - \frac{y_{\text{HF}}^{2n}}{K_p} \right)}$$

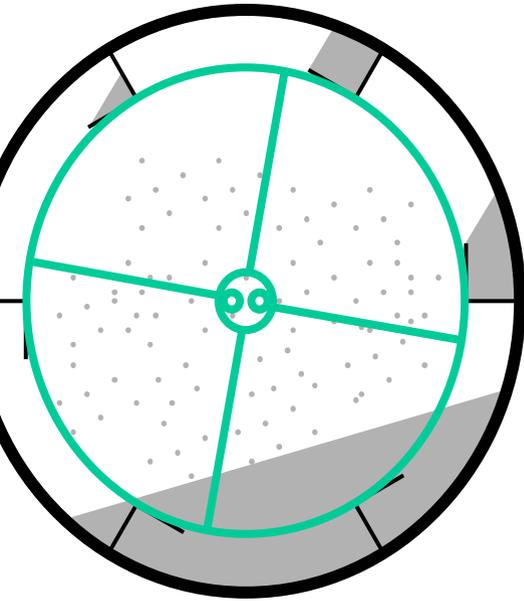
$$\frac{dX_{11}}{dt} = \frac{1}{t_{\text{ext } 11} + t_{\text{dif } 11} \cdot f(\Gamma, X_{11}) + t_{\text{chim } 1}}$$

$$f(\Gamma, X_{11}) = \frac{\Gamma \cdot (\Gamma - \sin \Gamma) \cdot (1 - X_{11}) - c \cdot b \cdot (\Gamma - \sin \Gamma)^b \cdot (1 - X_{11})^b}{\frac{\Gamma^2}{2} + \cos \Gamma - 1}$$

Dans le fond du four (zone de poudre 1, réaction 1)



Bilans thermiques



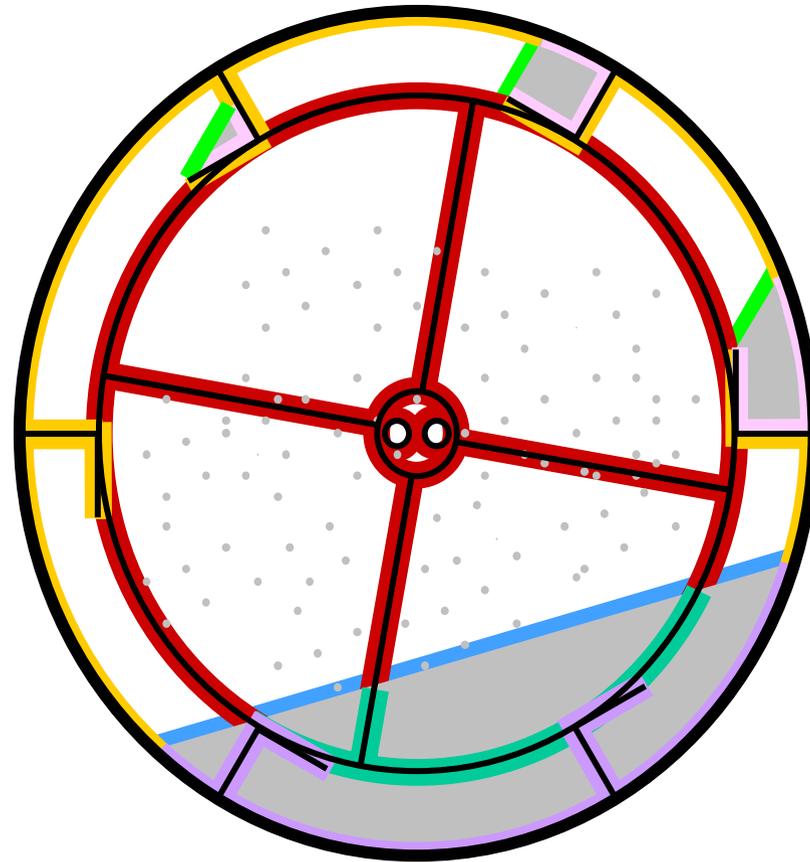
bilans sur

- ☞ charge solide
- ☞ phase gazeuse
- ☞ équipements internes

hypothèses principales

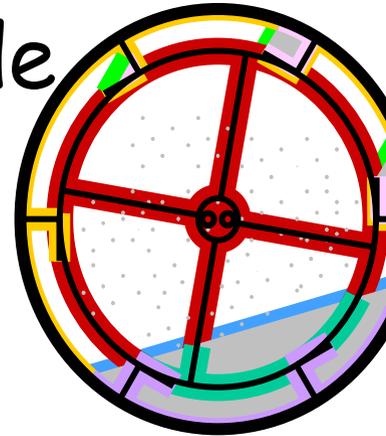
- ☞ températures uniformes dans une section
- ☞ échanges par convection et rayonnement uniquement radiaux
- ☞ pas de conduction axiale

Surfaces d'échanges thermiques



⇒ calculs géométriques

Bilan thermique sur le solide



$$\phi_s(k-1) \cdot C_p \left(\frac{T_s(k) + T_s(k-1)}{2} \right) \cdot T_s(k) =$$

$$\phi_s(k-1) \cdot C_p \left(\frac{T_s(k) + T_s(k-1)}{2} \right) \cdot T_s(k-1) - \dot{Q}_{conv}^s - \dot{Q}_{ray}^s - \dot{Q}_{ré}^s$$

$$S_{s1g} = 2 \cdot R \cdot \sin \frac{\Gamma}{2}$$

$$\begin{aligned} \dot{Q}_{conv} = & h_{s1g} \cdot S_{s1g} \cdot (T_s(k) - T_g(k)) + h_{s2g} \cdot S_{s2g} \cdot (T_s(k) - T_g(k)) \\ & + h_{s3g} \cdot S_{s3g} \cdot (T_s(k) - T_g(k)) + h_{s1p} \cdot S_{s1p} \cdot (T_s(k) - T_p(k)) \\ & + h_{s2p} \cdot S_{s2p} \cdot (T_s(k) - T_p(k)) + h_{sli} \cdot S_{sli} \cdot (T_s(k) - T_i(k)) \end{aligned}$$

$$\dot{Q}_{ray} = \begin{cases} 0 & \text{si } \Gamma < 2 \cdot \cos^{-1} \left(\frac{R_{cerce}}{R} \right) \\ R_{cerce} \cdot \left(\frac{2 \cdot \Gamma \cdot l_{cerce} + 1 - \cos \frac{\Gamma}{2}}{2} \right) \cdot \sigma \cdot \left[\begin{aligned} & \left(X_1(k) - X_1(k-1) \right) \cdot \Delta r H_1 \\ & + \left(X_2(k) - X_2(k-1) \right) \cdot \Delta r H_2 \\ & + \left(X_3(k) - X_3(k-1) \right) \cdot \Delta r H_3 \end{aligned} \right] \end{cases}$$

$$S_{s2g} = N \cdot \left[\begin{aligned} & \frac{h_p}{2 \cdot \sin(\gamma - \delta)} \cdot (1 - \epsilon_g) \cdot F_{sp} \cdot (T_s^4(k) - T_p^4(k)) \\ & + \frac{h_p}{2 \cdot \sin(\delta - \gamma)} \cdot (1 - \epsilon_g) \cdot F_{si} \cdot (T_s^4(k) - T_p^4(k)) \\ & + \epsilon_s \cdot \epsilon_g \cdot (T_s^4(k) - T_g^4(k)) \end{aligned} \right]$$

Conclusion : construction du modèle

piston

répartition
transversale
et
axiale

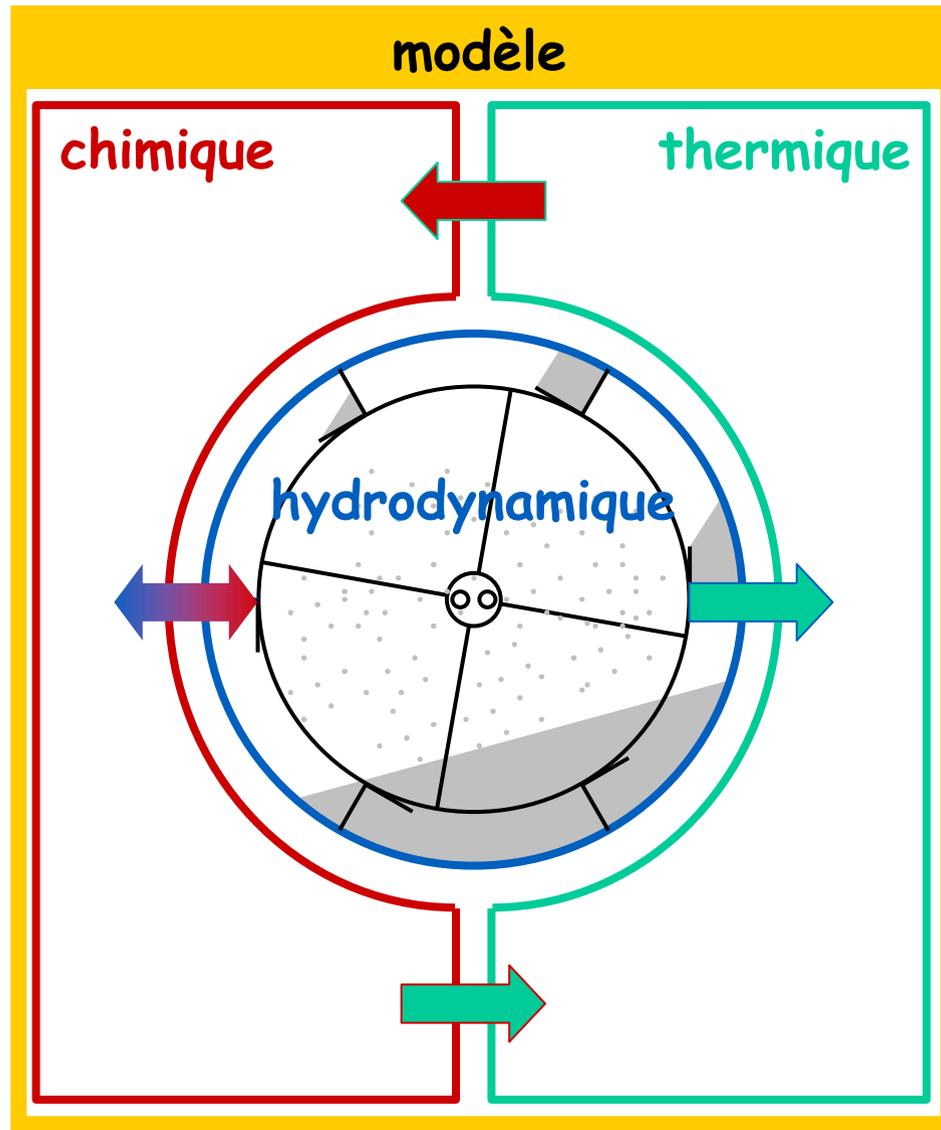
étapes

↓

lois cinétiques

↓

zones



surfaces

↓

coefficients

↓

bilans

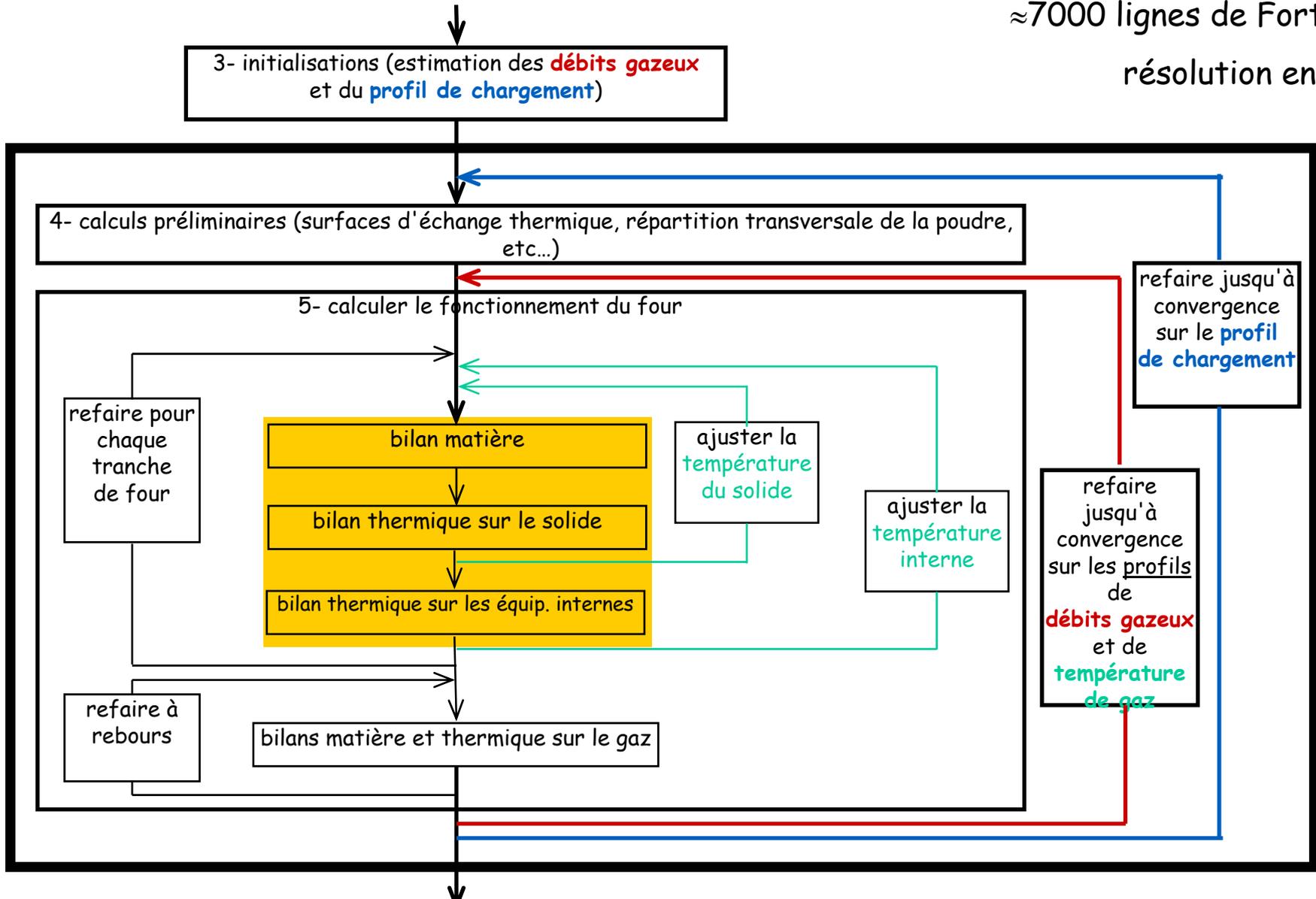
profils
températures,
compositions

↓

pistes pour
l'amélioration

Organigramme du code de calcul correspondant

≈7000 lignes de Fortran
résolution en 15





Marie DEBACQ-LAPASSAT

Exemples d'usages et de besoins en calcul scientifique pour le génie des procédés

modélisation et simulation en génie des procédés



Société Française
de Génie des Procédés

Des réponses aux défis
industriels du XXI^{ème} siècle

Groupe Informatique Et Procédés I.E.P.

☞ Computers And Process Engineering C.A.P.E.

Ce Groupe Thématique de la Société Française de Génie des Procédés, créé en 1989, s'est fixé pour objectif l'animation scientifique en France dans le domaine de l'informatique appliquée au génie des procédés. Il vise à promouvoir l'application de l'informatique pour la conception, l'analyse et la conduite des procédés, et en particulier à :

- favoriser l'échange des expériences et des méthodes ;
- encourager la circulation de l'information entre industriels et universitaires ;
- favoriser le dialogue avec les pouvoirs publics ;
- affirmer la présence de la France au niveau européen et international.

La présidence du Groupe est assurée alternativement par un industriel et un universitaire. Les tâches d'organisation et de contact sont largement réparties entre les membres du Groupe.

Les réunions régulières du Groupe ont lieu en principe le 2^e mardi des mois impairs. Elles ont souvent lieu chez l'une ou l'autre des institutions représentées régulièrement au sein du groupe. En outre, le Groupe organise une fois par an des Forums sur des sujets qu'il juge suffisamment mûrs et mobilisateurs. Il veille alors à assurer un bon équilibre entre exposés d'origine industrielle- proches des besoins- universitaires- plus prospectifs- .

Ses domaines privilégiés d'intervention sont la modélisation, la simulation et le contrôle des procédés. Pour être membre du Groupe, il faut être adhérent de la SFGP, ou appartenir à une société adhérente de ces organisations. Les participants aux réunions sont équitablement répartis entre industriels et universitaires.

Groupe
I.E.P.

Animateurs

Présidente : Xuan Meyer - Ensiacet

Vice-président : Stéphane Déchelotte - Prosim

Contexte, objectifs & intérêts

contexte

- contraintes environnementales ; réduction des coûts ; qualité
 - ↳ plus de **rigueur** dans la conception et l'exploitation des procédés ➡ simulateurs

objectifs

- en conception : **optimisation & dimensionnement**
 - ↳ modèle fidèle, souvent statique, temps de calcul parfois long
- en exploitation : **contrôle-commande & évolutions**
 - ↳ modèle dynamique, temps de calcul < dynamique du système

intérêts

- rapidité de réponse / expériences sur pilote
- conception rigoureuse ➡ économies sur l'investissement
- cohérence des données

Modélisation : une définition

qu'est-ce qu'un modèle ?

➤ une **organisation/capitalisation de la connaissance**

➤ une **représentation du réel**

↳ "Un objet A est un modèle d'un objet B si un observateur peut utiliser A pour répondre aux questions qui l'intéresse à propos de B"
MINSKY, 1985

↳ "abstraction de la réalité qui peut être utilisée pour représenter **certain**s aspects d'un procédé réel, considérés comme importants par le modelleur"
MARQUARDT, 1994

Simulation : une définition

qu'est-ce qu'une simulation ?

- un calcul (généralement non-manuel)
 - ↳ résolution d'une (ou plusieurs) équation(s couplées) à partir de données d'entrée, éventuellement sous contraintes

méthodes numériques

- interpolation / extrapolation
- intégration
 - trapèzes, Simson, Milne, ...
- résolution d'équations algébriques / différentielles / systèmes
 - Newton, dichotomie, Gauss, Jacobi, Runge-Kutta, ...
- opérations sur les matrices
- méthodes d'optimisation
 - Fibonacci, simplex, Newton-Raphson, ...

Différents types de logiciels

simulateurs de procédés

➤ approche modulaire ; serveur de propriétés

↳ ProSim, Aspen-Hysys, Pro-II, Chemcad, ...

logiciels de mécanique des fluides numérique

➤ résolution de l'équation de Navier-Stokes

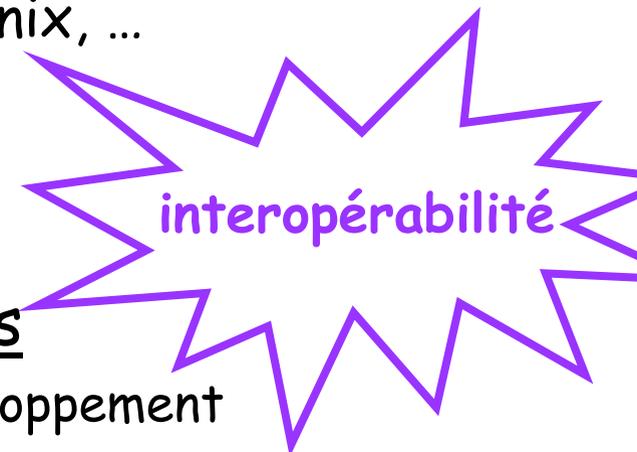
+ loi de continuité + 1er principe de la thermodynamique

↳ Fluent, Comsol, Phoenix, ...

logiciels de modélisation moléculaire

logiciels pour des opérations spécifiques

◆ logiciels équipementiers & modèles en développement



interopérabilité

Exemple de simulateur de procédés : ProsimPlus

ProsimPlus - C:\Program Files\ProSimPlus

Édition Configuration Procédé Outils

Vue

- Créer une vue
- Supprimer cette vue
- Modifier cette vue

Fichier

- Ouvrir...
- Enregistrer sous...

Modifications

- Défaire
- Refaire

Outils

- Copier
- Coller
- Imprimer

Constituant

Nom : CARBON MONOXIDE
ID : {1A14433F-3AA9-4824-B590-3E973FED0778}
ID original : 908
Emplacement original : Component Plus\ProSimPlus\Methanol Process.pmp

Précédent Suivant

Moilaire °C J/mol/K

Chaleur spécifique gaz parfait (J/mol/K)

The graph shows the specific heat capacity of carbon monoxide gas as a function of temperature. The x-axis represents temperature in degrees Celsius, ranging from -400 to 1400. The y-axis represents specific heat capacity in J/mol/K, ranging from 30 to 36. The curve starts at approximately 29.1 J/mol/K at -213.15 °C and increases monotonically, reaching about 35.2 J/mol/K at 1226.85 °C.

Température (°C)	Chaleur spécifique gaz parfait (J/mol/K)
-213,15	29,1080
1226,85	35,2

Echelle logarithmique Echelle 1/T

Graphique Grille Formulation

Outils graphiques

TMin TMax Points

-213,15 °C 1226,85 °C 20

Température Propriété

-213,15 °C 29,1080 J/mol/K

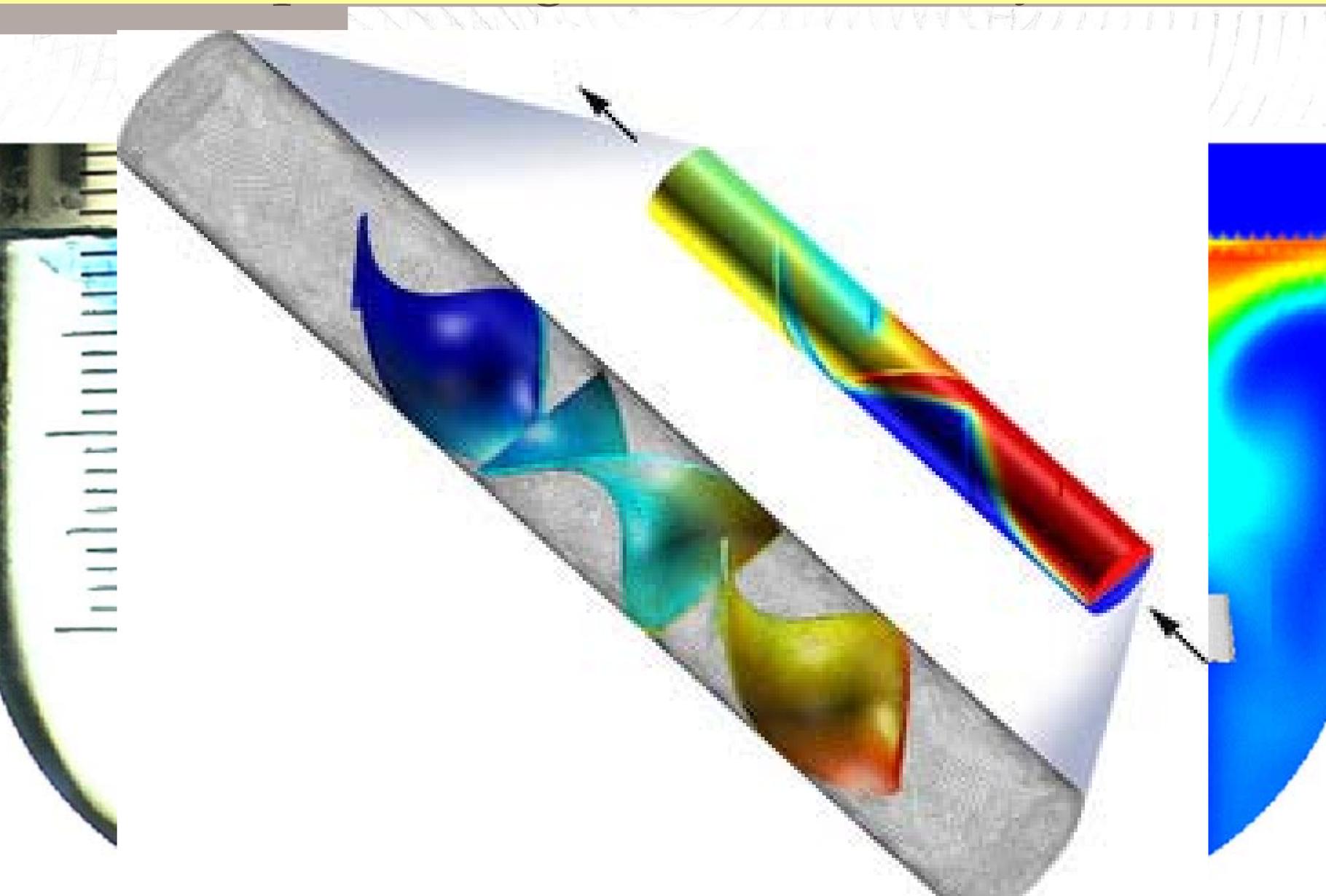
Copier Imprimer Rafraîchir Régression

Propriétés Valeur

- Identification
- Atomique
- Changement de phase
- Combustion, sécurité, toxicité
- Phase condensée
- Thermo-chimique
- Interaction, réaction phase gaz
- Propriétés utilisateur
- Propriétés dépendantes de la température
 - Chaleur spécifique solide
 - Chaleur spécifique liquide
 - Chaleur spécifique gaz parfait**
 - Pression de vapeur saturante
 - Enthalpie de vaporisation
 - Conductivité thermique solide
 - Conductivité thermique liquide
 - Conductivité thermique gaz
 - Viscosité liquide
 - Viscosité gaz
 - Masse volumique solide
 - Masse volumique liquide
 - Tension superficielle
 - Second coefficient du Viriel
 - Constante de la loi de Henry pour le...
 - Chaleur spécifique liquide à dilution i...

Complète

Exemple de logiciel CFD : Comsol



Types de modèles

TI
J102

➤ modèle de connaissance pure

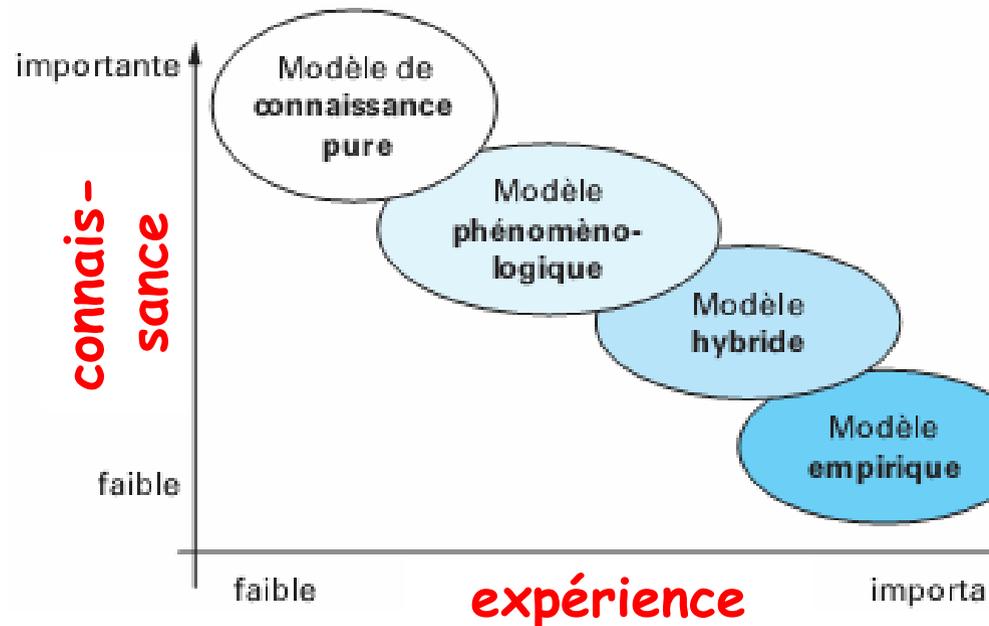
- ◆ équation de Navier-Stokes + loi de continuité + 1^{er} principe de la thermodynamique

↳ rarement envisageable aujourd'hui

➤ modèle phénoménologique

➤ modèle empirique

➤ modèle hybride



Modèles empiriques

modèle comportementaux - boîte noire

➤ principe :

- ◆ forcer une structure mathématique donnée à obéir à des observations expérimentales
- ◆ corrélation entre paramètres influents et réponse(s) du système
 - fonction de transfert, réseaux de neurones, etc.

➤ avantages / inconvénients :

- 👍 très bonne représentation du système localement
- 👎 nécessité de grandes quantités de données expérimentales
- 👎 faible caractère prédictif en dehors du domaine d'apprentissage

↳ adapté au contrôle de systèmes non linéaires

Modèles phénoménologiques

boîte grise

➤ principe :

- ◆ transformer une intuition physique en une structure mathématique

- ◆ couplage matière/énergie

en simplifiant la représentation de l'hydrodynamique

- équations de conservation ; équations constitutives ; équations de contraintes

➤ avantages / inconvénients :

- 👍 meilleure "extrapolabilité" ; réutilisation facilitée

- 👍 nombre de paramètres à identifier limité (paramètres physiques)

- 👎 temps de développement

- 👎 difficulté de simulation

↳ conception, formation d'opérateur,
développement de procédé, contrôle prédictif

Modèles hybrides

↳ applications particulières :
systèmes réactifs complexes

- ◆ systèmes biologiques
- ◆ combustions
- ◆ etc.

Représentation de la matière

système chimique "classique"

- propriétés des corps purs + lois de mélange

systèmes plus complexes

- ◆ mélanges d'hydrocarbures
- ◆ mélanges d'électrolytes
- ◆ polymères
- ◆ poudres
- ◆ matières agricoles
- ◆ systèmes biologiques
 - ↳ pseudo-constituant
 - ↳ bilans de populations

Formulation du modèle phénoménologique

équations de conservation

- masse
- énergie
- (quantité de mouvement)

↳ "enceinte" & formulation du bilan

équations constitutives

- ◆ lois de vitesse
- ◆ modèles thermodynamiques
- ◆ corrélations

équations de contraintes

- ◆ équations de fermeture
- ◆ équations d'équilibre
- ◆ conditions aux limites (homogènes-symétries ; hétérogènes-interfaces)
- ◆ contraintes mathématiques (contrôle & optimisation)

phénomènes limitants identifiés
&
hypothèses énoncées
en fonction des objectifs du modèle

reformulation
en vue de la simulation

Réformulation du modèle en vue de sa simulation

réduire le nombre de variables et d'équations

- recombinaisons d'équations
- bilans par atome ou groupement ou degré d'oxydation plutôt que par espèce

exploiter au mieux la structure du système d'équations

- matrice tridiagonale

éviter les limites vers zéro ou l'infini

- réécriture des constantes d'équilibre par exemple

Identification du modèle

grandeurs physiques

- tables (domaine de validité)
- expériences spécifiques (variance et région de confiance)

autres paramètres du modèle

- nécessité d'un pilote
ou de données sur une installation industrielle



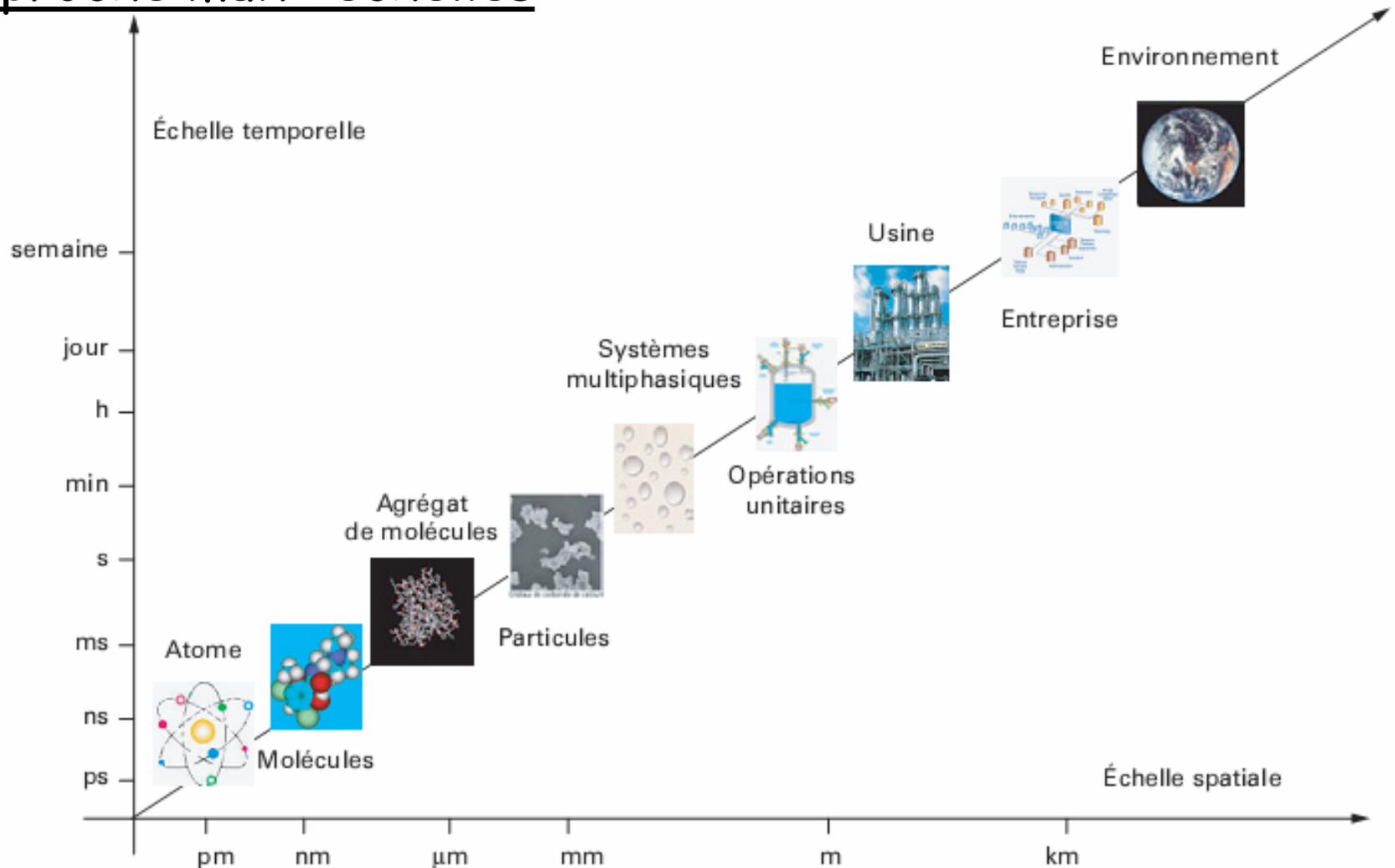
Validation du modèle

confrontation des résultats d'une simulation
à des mesures sur le système réel

↪ parfois nécessité de reformuler le modèle
si les variables mesurables sur le système réel
sont différentes des variables calculées

Défi pour les années à venir

approche multi-échelles



"Ma conclusion"

pratique de la modélisation en GP

- celui qui modélise est proche du procédé
- lien fort avec l'expérience, les mesures
- d'abord l'hydrodynamique puis les bilans de matière et de chaleur
- le modèle se résume rarement à un système d'équations
- sous-traiter la simulation => danger !
- CFD = une affaire d'experts

difficultés :

- ☞ représentation de la matière
- ☞ représentation de l'hydrodynamique
- ☞ "bricolage" par méconnaissance des techniques numériques
- ☞ étape de validation