



Chapitre III : Modèles thermodynamiques du Logiciel Aspen Hysys

III-1- Introduction

Les modèles thermodynamiques sont des représentations mathématiques du comportement des systèmes chimiques basées sur les principes de la thermodynamique. Dans Aspen Hysys, les modèles thermodynamiques sont utilisés pour prédire les propriétés des fluides, telles que la pression, la température et la composition, dans différentes conditions.

La sélection d'un modèle thermodynamique approprié est essentielle pour prédire avec précision le comportement d'un système chimique. Aspen Hysys propose plusieurs modèles thermodynamiques, notamment des modèles d'équations d'état et des modèles de coefficients d'activité, qui peuvent être utilisés pour différents types de systèmes chimiques.

Les modèles d'équations d'état, tels que les modèles de Peng-Robinson et de Soave-Redlich-Kwong, sont basés sur le concept d'un gaz hypothétique qui obéit aux lois de la thermodynamique. Ces modèles tiennent compte des forces intermoléculaires entre les molécules et sont utiles pour prédire l'équilibre liquide-vapeur et le comportement de phase de composés non polaires et polaires, respectivement.

Les modèles de coefficients d'activité, tels que le modèle Non-Random Two-Liquid, sont utilisés pour décrire le comportement non idéal des mélanges liquides. Ces modèles tiennent compte des interactions entre les molécules en solution, telles que les liaisons dipôle-dipôle et les liaisons hydrogène, et peuvent prédire avec précision les coefficients d'activité et le comportement de phase des mélanges aqueux et d'autres mélanges polaires.

La précision des modèles thermodynamiques utilisés dans Aspen Hysys est essentielle pour la conception et l'optimisation des processus industriels. En sélectionnant un modèle approprié et en ajustant ses paramètres, les ingénieurs de



processus peuvent prédire avec précision le comportement d'un système chimique et optimiser le processus pour une efficacité et une productivité maximales.

Les modèles thermodynamiques dans Aspen Hysys sont des outils essentiels pour simuler des systèmes chimiques et prédire leur comportement dans différentes conditions. Ces modèles fournissent des informations critiques pour la conception et l'optimisation des processus industriels et constituent un élément clé de la boîte à outils du génie des procédés.

III-2- Types de modèles thermodynamiques dans Aspen Hysys

Aspen Hysys propose différents types de modèles thermodynamiques pour simuler le comportement des mélanges de composés chimiques. Voici quelques-uns des modèles disponibles :

- **Modèles de l'équation d'état** : Ces modèles sont basés sur des équations d'état qui décrivent le comportement thermodynamique des mélanges. Ils incluent des modèles comme Peng-Robinson, Soave-Redlich-Kwong, et Lee-Kesler.
- **Modèles de la solution idéale** : Ces modèles supposent que les composés d'un mélange obéissent aux lois de la solution idéale. Ils incluent des modèles comme le modèle de Raoult, le modèle de Wilson, et le modèle de NRTL.
- **Modèles de la solution régulière** : Ces modèles sont basés sur la théorie de la solution régulière, qui considère les interactions entre les molécules comme étant régulières. Ils incluent des modèles comme le modèle UNIQUAC, le modèle UNIFAC, et le modèle ASOG.
- **Modèles de la solution électrolytique** : Ces modèles sont utilisés pour simuler des mélanges contenant des électrolytes. Ils incluent des modèles comme le modèle de Debye-Hückel et le modèle de Pitzer.

Chacun de ces modèles a ses propres avantages et inconvénients, et le choix du modèle approprié dépend des propriétés des composés du mélange et de l'objectif



de la simulation.

III-2-1-Les équations d'état

Il existe différents modèles d'équations d'état disponibles dans Aspen Hysys, chacun ayant ses propres avantages et limites en termes de plage de températures et de pressions applicables. Voici une liste des principaux modèles d'équations d'état utilisés dans Aspen Hysys et leur plage de températures et de pressions applicables:

- **Modèle Peng-Robinson :** Le modèle Peng-Robinson est un modèle d'équation d'état à deux paramètres qui peut être utilisé pour modéliser une grande variété de mélanges. Il est souvent utilisé pour modéliser les mélanges d'hydrocarbures. Sa plage de température d'application est de -50 °C à 200 °C , et sa plage de pression d'application est de $0,1\text{ kPa}$ à 20 MPa .

L'équation d'état Peng-Robinson est une équation à deux paramètres qui prend en compte les effets des interactions moléculaires dans les mélanges. Elle est donnée par :

$$p = \frac{RT}{(v-b)} - \left(\frac{a\alpha}{v(v+b)+b(v-b)} \right)$$

où p est la pression, R est la constante des gaz parfaits, T est la température, v est le volume molaire, b est le paramètre de volume critique, a est le paramètre d'interaction, α est un facteur de correction de température, et $v + b$ représente le volume total du mélange.

Le paramètre a est donné par : $a = (0,45724R^2T_c^2/p_c) * \alpha$

Le paramètre b est donné par : $b = (0,07780RT_c/p_c)$

Le facteur de correction de température α est donné par : $\alpha = (1 + m*(1 - (T/T_c)^{0.5}))^2$, où m est un paramètre empirique.

- **Modèle Soave-Redlich-Kwong :** Le modèle Soave-Redlich-Kwong est un modèle d'équation d'état à trois paramètres qui est souvent utilisé pour modéliser les mélanges de gaz. Sa plage de température d'application est de -100 °C à 160 °C , et sa plage de pression d'application est de $0,1\text{ kPa}$ à 10 MPa .



L'équation d'état Soave-Redlich-Kwong est une équation à trois paramètres qui prend également en compte les effets des interactions moléculaires. Elle est donnée par :

$$p = (RT/(v-b)) - (a\alpha/(v(v+b)+b(v-b)))$$

où p est la pression, R est la constante des gaz parfaits, T est la température, v est le volume molaire, b est le paramètre de volume critique, a est le paramètre d'interaction, α est un facteur de correction de température, et $v + b$ représente le volume total du mélange.

Le paramètre a est donné par : $a = (0,42748R^2T_c^{2.5})/p_c(1 + m(1 - (T/T_c)^{0.5}))^2$

Le paramètre b est donné par : $b = 0,08664RT_c/p_c$

Le facteur de correction de température α est le même que pour le modèle Peng-Robinson.

- **Modèle Lee-Kesler** : Le modèle Lee-Kesler est un modèle d'équation d'état à deux paramètres qui est souvent utilisé pour modéliser les mélanges de gaz. Il est plus précis que le modèle SRK à des températures élevées et des pressions élevées. Sa plage de température d'application est de -50 °C à 200 °C , et sa plage de pression d'application est de $0,1\text{ kPa}$ à 20 MPa .

L'équation d'état Lee-Kesler est une équation à deux paramètres qui prend également en compte les effets des interactions moléculaires. Elle est donnée par :

$$p = (RT/(v-b)) - (A\alpha/(v(v+b)+b(v-b)))$$

où p est la pression, R est la constante des gaz parfaits, T est la température, v est le volume molaire, b est le paramètre de volume critique, A est un paramètre d'interaction, α est un facteur de correction de température, et $v + b$ représente le volume total du mélange.

Le paramètre A est donné par : $A = ap_c/(R^*T_c)^2$

Le paramètre b est donné par : $b = 0,08664RT_c/p_c$



Le facteur de correction de température α est donné par : $\alpha = (1 + m*(1 - (T/T_c)^{0.5}))^2$, où m est un paramètre empirique

- **Modèle PRSV (Peng-Robinson-Stryjek-Vera):** Le modèle PRSV est une extension du modèle Peng-Robinson qui prend en compte les interactions entre les molécules. Il utilise une équation d'état à quatre paramètres pour calculer les propriétés des mélanges de gaz et de liquides. Les paramètres de l'équation d'état sont déterminés à partir des propriétés critiques et des facteurs d'acentricité des composants.

Le modèle PRSV est souvent considéré comme plus précis que le modèle Peng-Robinson standard, en particulier pour les mélanges contenant des composants polaires ou des composants asymétriques. Sa plage de température d'application est de -100°C à 650°C , et sa plage de pression d'application est de 0,1 kPa à 200 MPa.

L'équation d'état est donnée par :

$$p = \frac{RT}{(v-b)} - \frac{a}{(v*(v+b)+b*(v-b))}$$

où p est la pression, R est la constante des gaz parfaits, T est la température, v est le volume molaire, b est le paramètre de volume critique, a est le paramètre d'interaction.

Le paramètre a est donné par : $a = 0.45724*(RT_c)^2/P_c\alpha(T)(1+m(1-\sqrt{(T/T_c)}))^2$

Le paramètre b est donné par : $b = 0.07780RT_c/p_c$

Les paramètres m et $\alpha(T)$ sont des fonctions de correction pour les effets des interactions moléculaires. Le paramètre m est donné par : $m = 0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2$, où ω est le facteur d'acentricité de la substance. Le paramètre $\alpha(T)$ est donné par : $\alpha(T) = [1 + \kappa(1 - \sqrt{(T/T_c)})]^2$, où κ est un paramètre de correction pour les effets des interactions moléculaires.

- **Modèle Soave-Redlich-Kwong (régularisé) :** Le modèle Soave-Redlich-Kwong régularisé est une modification du modèle SRK qui prend en compte les



effets des interactions entre les molécules. Il est souvent utilisé pour modéliser les mélanges contenant des composés polaires. Sa plage de température d'application est de -100 °C à 200 °C, et sa plage de pression d'application est de 0,1 kPa à 10 MPa.

L'équation d'état SRK régularisée est donnée par :

$$p = (RT/(v-b)) - (a\alpha/(v*(v+b)))$$

où p est la pression, R est la constante des gaz parfaits, T est la température, v est le volume molaire, b est le paramètre de volume critique, a est le paramètre d'interaction, et α est un facteur de correction de température.

Le paramètre a est donné par : $a = (0,42748R^2T_c^2)/P_c*(\Omega/\Omega-0.0863)^2$

Le paramètre b est donné par : $b = 0,08664RT_c/p_c$

Le facteur de correction de température α est donné par : $\alpha = [1 + m(1 - (T/T_c)^{0.5})]^2$, où m est un paramètre d'interaction empirique.

III-2-2- Certains modèles connus d'autres types

- **Le modèle NRTL (Non-Random Two Liquid):** Le modèle NRTL est particulièrement bien adapté aux mélanges contenant des composants polaires, des molécules de grande taille ou des molécules ayant des groupes fonctionnels complexes. Il est souvent utilisé dans l'industrie chimique pour la conception et l'optimisation de procédés impliquant des extractions liquide-liquide, des distillations azeotropiques ou des séparations de produits chimiques.

Le modèle NRTL nécessite la spécification de paramètres d'interaction binaires pour chaque paire de composants du mélange. Ces paramètres peuvent être déterminés expérimentalement à partir de données d'équilibre liquide-liquide ou calculés à partir de données thermodynamiques disponibles sur les composants individuels.

Le modèle NRTL utilise des équations complexes pour décrire l'équilibre liquide-liquide des mélanges. Les équations de base pour le modèle NRTL sont les suivantes :



$$\ln \gamma_i = \sum_j \tau_{ij} * G_{ij} / \sum_k G_{kj} * x_k$$

Où γ_i est le coefficient d'activité du composant i , τ_{ij} et G_{ij} sont les paramètres d'interaction binaires entre les composants i et j , et x_k est la fraction molaire du composant k dans la phase liquide.

La plage d'application de ce modèle dépend des données expérimentales utilisées pour déterminer les paramètres d'interaction binaires. En général, le modèle NRTL est considéré comme valide pour des températures et des pressions modérées, typiquement dans la plage de 273 K à 473 K et de 0,1 à 10 MPa. Cependant, il est important de vérifier la validité du modèle pour chaque système de mélanges spécifique.

Le modèle NRTL est souvent utilisé pour prédire l'équilibre liquide-liquide de mélanges contenant des composants polaires, des molécules de grande taille ou des molécules ayant des groupes fonctionnels complexes. Il est particulièrement utile pour les mélanges contenant des amines, des alcools, des cétones, des esters et des acides organiques.

- **Le modèle ASME Steam:** est un modèle thermodynamique qui permet de prédire les propriétés de la vapeur d'eau à haute pression et haute température. Ce modèle a été développé par l'American Society of Mechanical Engineers (ASME) pour fournir des données précises sur les propriétés de la vapeur d'eau utilisées dans les systèmes de production d'énergie, tels que les centrales électriques, les turbines à gaz et les chaudières.

Le modèle ASME Steam utilise l'équation d'état de l'eau IAPWS-IF97, qui est basée sur des données expérimentales pour décrire les propriétés thermodynamiques de l'eau dans un large domaine de températures et de pressions, allant de 273,15 K à 1073,15 K et de 0,1 MPa à 100 MPa. Ce modèle fournit des prédictions précises pour des propriétés telles que la densité, la viscosité, la chaleur spécifique, l'enthalpie, l'entropie et la conductivité thermique de la vapeur d'eau à haute pression et haute température.

Le modèle ASME Steam est couramment utilisé dans les logiciels de simulation de procédés pour modéliser les cycles de production d'énergie et les systèmes



de production de vapeur. Il est également utilisé dans les conceptions de systèmes de tuyauterie et d'appareils de chauffage pour garantir que les propriétés de la vapeur sont correctement prises en compte pour assurer une performance optimale et une sécurité accrue.

III-2-3- Recommandations pour la sélection du package thermodynamique

Selon la littérature et les connaissances partagées de l'ingénierie relatives aux paramètres de la simulation à l'aide d'Aspen Hysys, il existe trois références de recommandations largement connues, qui sont :

- Eric Carlson, "Don't gamble with physical properties for simulations,"
Chem. Eng. Prog. October 1996, 35-46
- Prof J.D. (Bob) Seader, University of Utah
- Hyprotech Recommendations

Chacun d'eux est basé sur les différents problèmes présentés précédemment, dans lesquels la sélection du modèle thermodynamique le plus approprié dépend directement des propriétés des composants utilisés dans la simulation et des paramètres associés.



➤ Les recommandations d'Eric Carlson

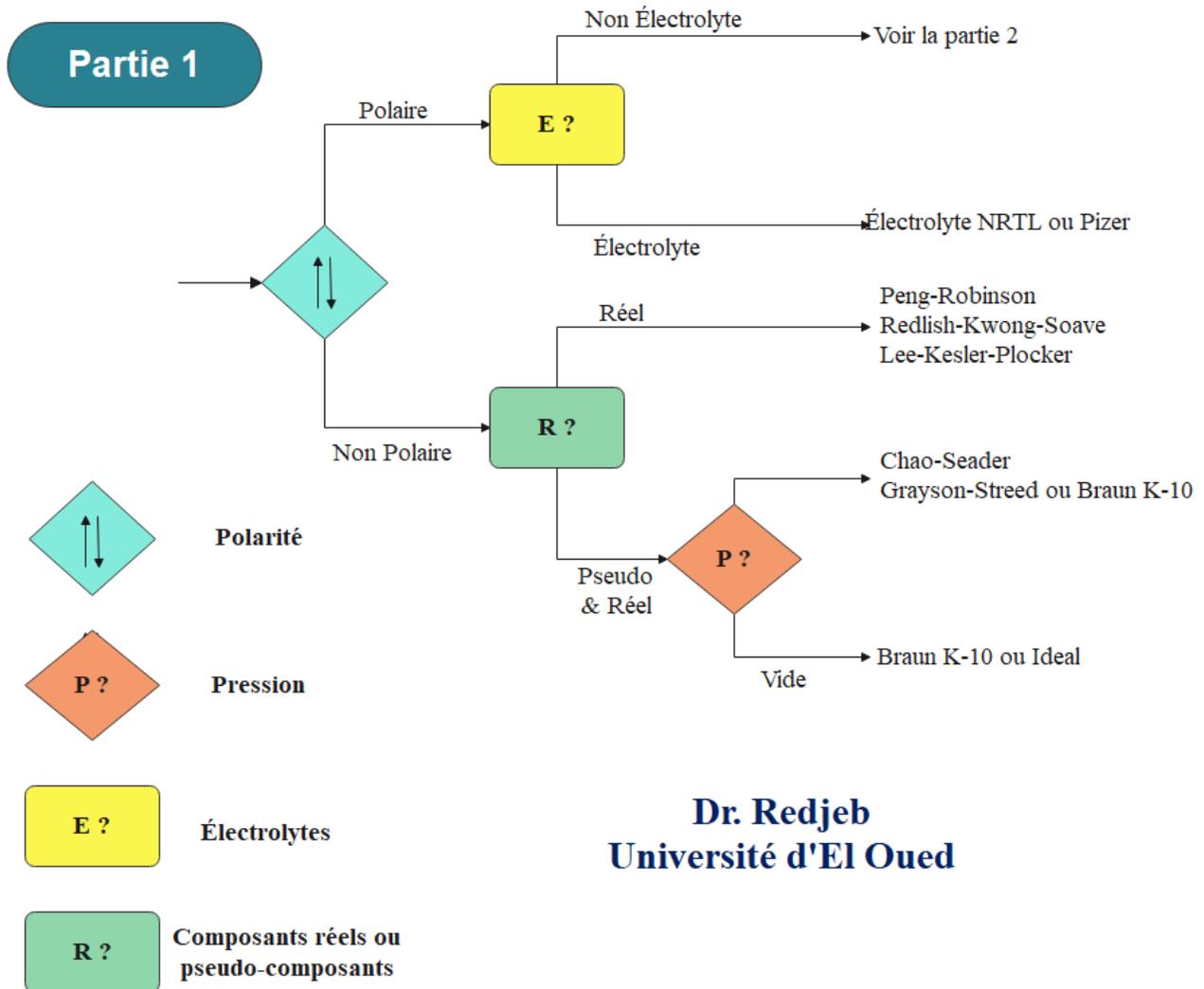
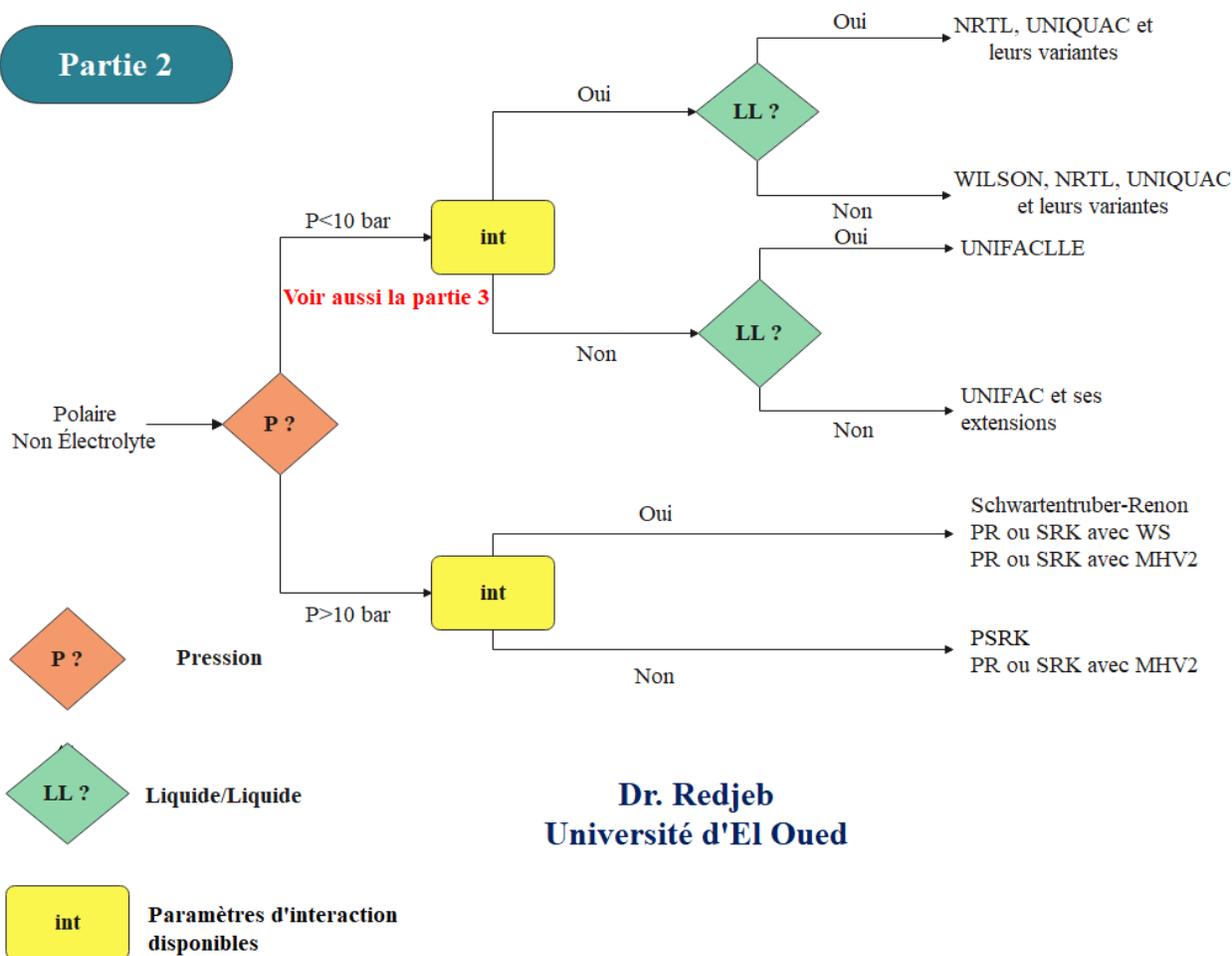


Figure 1. Recommandations d'Eric Carlson partie 01



Partie 2



Dr. Redjeb
Université d'El Oued

Figure 2. Recommandations d'Eric Carlson partie 02

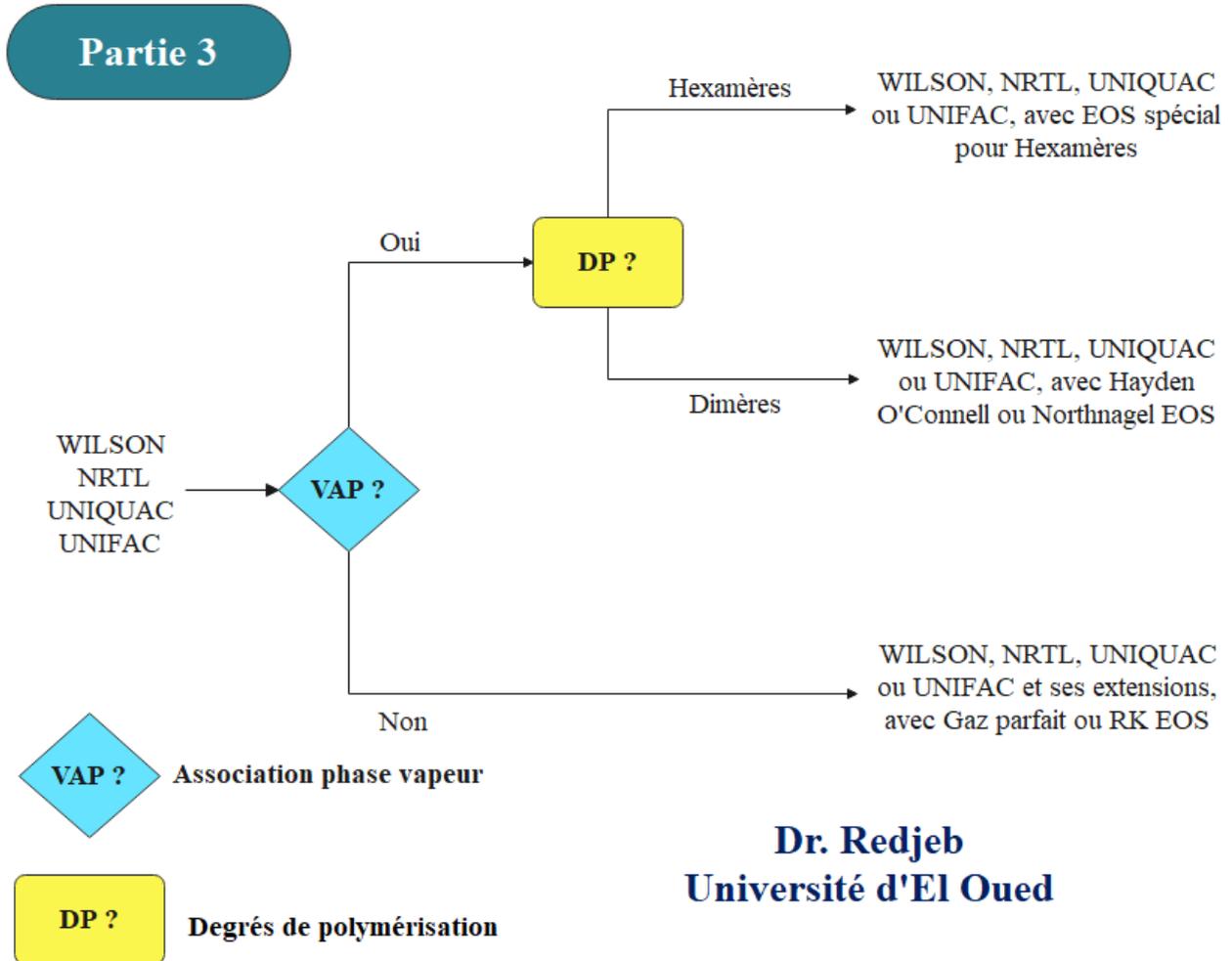


Figure 3. Recommandations d'Eric Carlson partie 03



➤ Les recommandations de Bob Seader

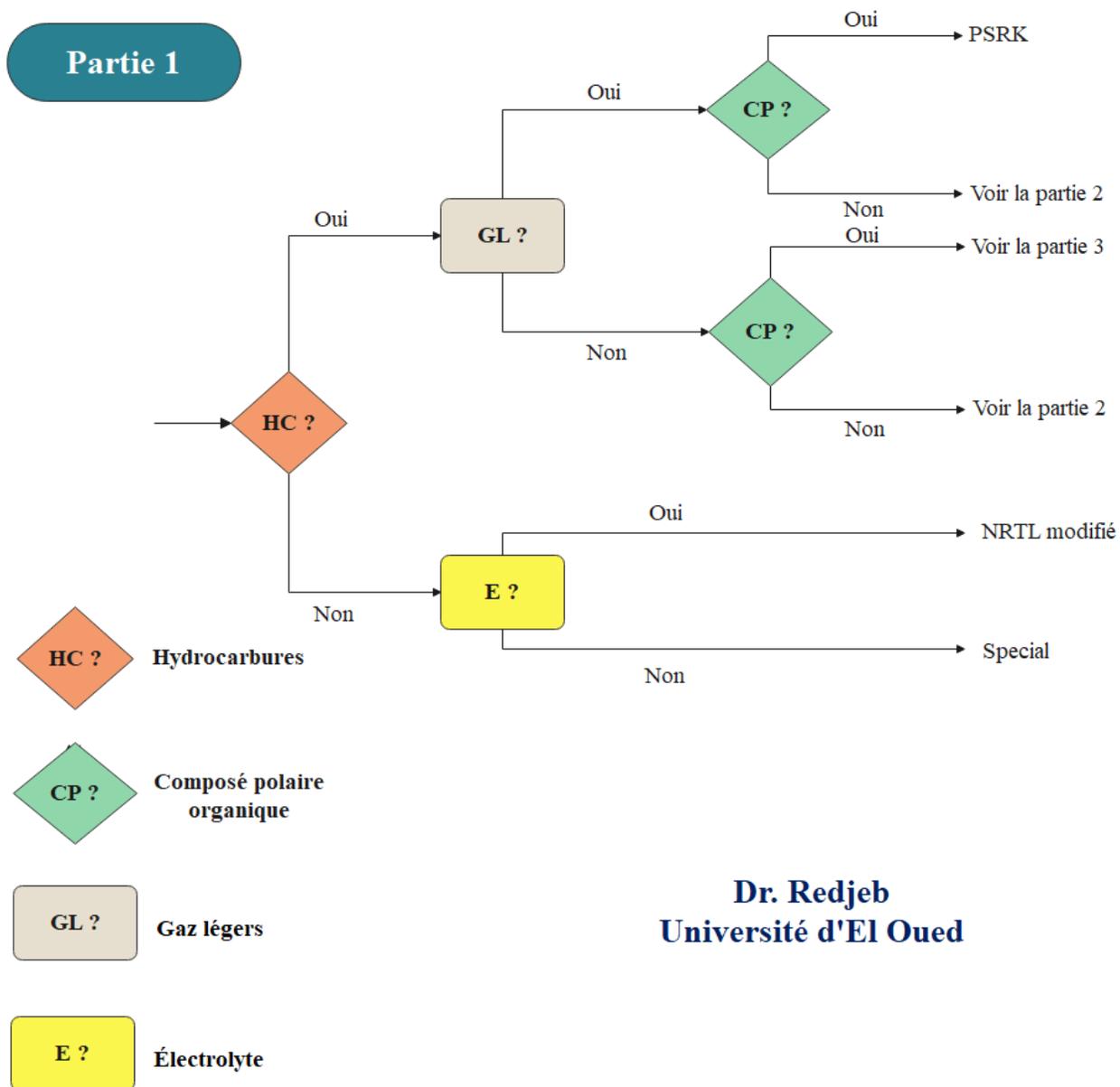
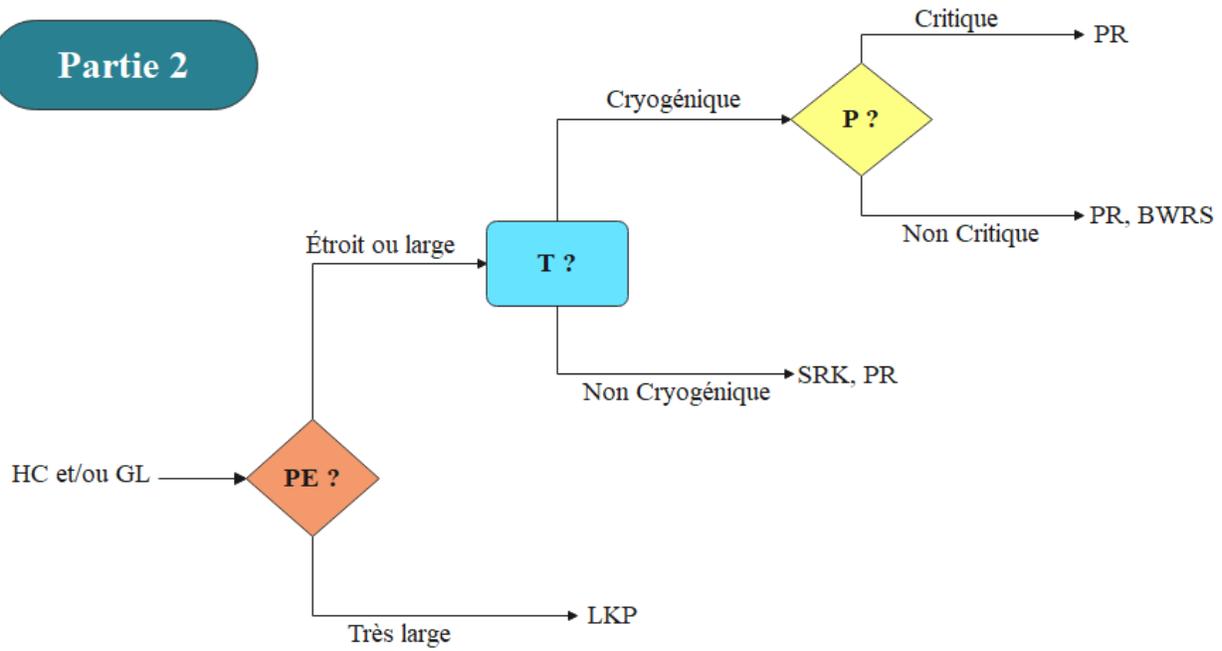


Figure 4. Recommandations de Bob Seader partie 01



Partie 2



PE ? Point d'ébullition du composé

P ? Pression

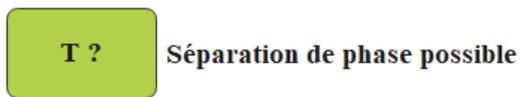
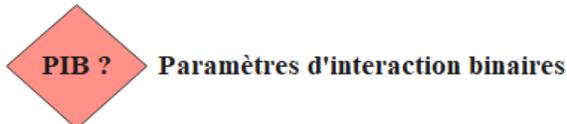
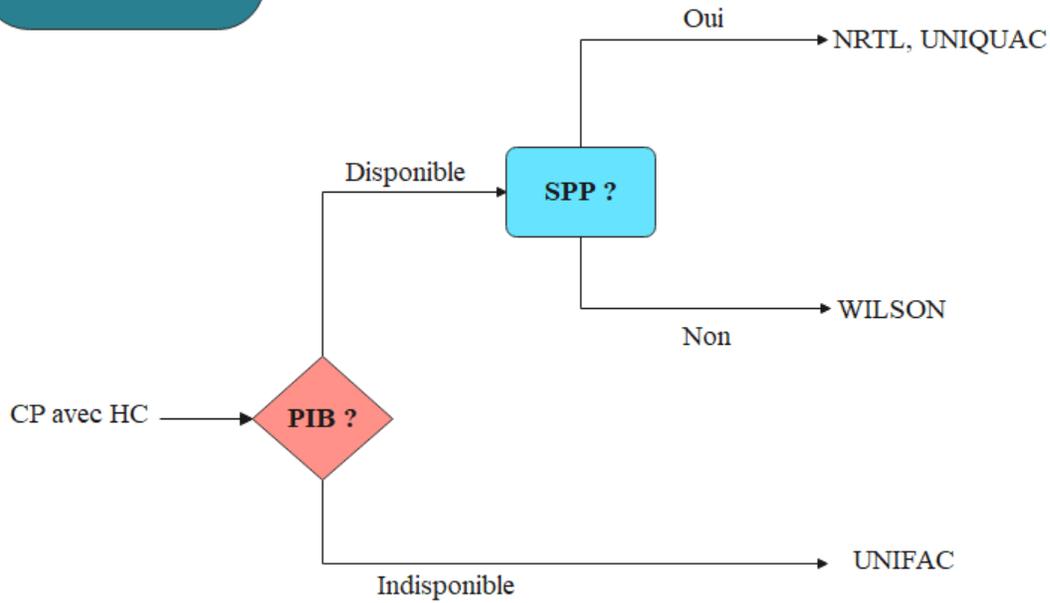
T ? Région de température

Dr. Redjeb
Université d'El Oued

Figure 5. Recommandations de Bob Seader partie 02



Partie 3



Dr. Redjeb
Université d'El Oued

Figure 6. Recommandations de Bob Seader partie 03



➤ **Hyprotech Recommendations**

Type of System	Recommended Property Method
TEG Dehydration	PR
Sour Water	PR, Sour PR
Cryogenic Gas Processing	PR, PRSV
Air Separation	PR, PRSV
Atm Crude Towers	PR, PR Options, GS
Vacuum Towers	PR, PR Options, GS (<10 mm Hg), Braun K10, Esso K
Ethylene Towers	Lee Kesler Plocker
High H ₂ Systems	PR, ZJ or GS (see T/P limits)
Reservoir Systems	PR, PR Options
Steam Systems	Steam Package, CS or GS
Hydrate Inhibition	PR
Chemical systems	Activity Models, PRSV
HF Alkylation	PRSV, NRTL (Contact Hyprotech)
TEG Dehydration with Aromatics	PR (Contact Hyprotech)
Hydrocarbon systems where H ₂ O solubility in HC is important	Kabadi Danner
Systems with select gases and light hydrocarbons	MBWR

Figure 7. Recommendations proposées par Hyprotech



Références

Alexandre C. Dimian, Costin Sorin Bildea, *Chemical Process Design: Computer-Aided Case Studies*, John Wiley & Sons, Apr 2008 - 527 pages.

Computer-aided Industrial Process Design: The ASPEN Project: Functional Specifications for ASPEN, Sixth Quarterly Progress Report, Department of Chemical Engineering and Energy Laboratory, Massachusetts Institute of Technology Cambridge.

Juma Haydary, *Chemical Process Design and Simulation: Aspen Plus and Aspen Hysys Applications*, Willey, ISBN: 978-1-119-08911-7, January 2019, 448 Pages.

AspenTech. (2010). *Aspen HYSYS Dynamics - User Guide v7.2*. In *Aspen HYSYS Dynamics*.

Guide, O. (2009). *Aspen HYSYS. Aspentech Operation Guides*.

Pour les autres chapitres ou plus d'informations, merci d'utiliser le code QR

