Développement d'un simulateur d'une colonne de distillation discontinue pour des étudiants de Bachelor Universitaire de Technologie

Pierre-François BIARD[1,2], Catherine COURIOL[1,2]

Affiliation 1 : Univ Rennes, Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Rennes, CNRS, ISCR – UMR6226, F-35000 Rennes, France

Affiliation 2: Institut Universitaire de Technologie de Rennes – Département chimie, 3 rue du Clos Courtel, BP 90422, 35704 Rennes CEDEX 7, France

Introduction

Les Instituts Universitaires de Technologie (IUT) sont des établissements d'enseignement supérieur délivrant une formation théorique et technique professionnalisante. Depuis la rentrée de septembre 2021, les IUT déploient un nouveau diplôme à Bac + 3 (grade de Licence), le Bachelor Universitaire de Technologie (B.U.T.), appelé à remplacer l'historique D.U.T. (Bac + 2).

Dans le B.U.T. chimie, le génie des procédés est enseigné en tronc commun en première année (thermique, mécanique des fluides, bilan de matière) et en deuxième année (opérations unitaires et séparations). Les étudiants ont ainsi une formation théorique et pratique sur la distillation et la rectification. Dès la deuxième année, les étudiants sont amenés à choisir un parcours parmi 4 au niveau national, recouvrant les différents grands domaines de la chimie, dont un parcours Chimie Industrielle. Ce parcours comporte en 3ème année un module intitulé « Conduite et simulation de procédés ». C'est dans le cadre de ce module qu'a été développé un simulateur de rectification discontinue, pour une utilisation en séance de travaux pratiques. Ce simulateur codé sur Visual Basic pour Applications (VBA intégré à Excel) est basé sur la méthode de Mc-Cabe et Thiele, méthode graphique encore largement enseignée mais qui doit respecter quelques contraintes (colonne adiabatique, L_v molaire des constituants proches, absence de chaleur de mixtion). Celle-ci permet aux étudiants d'appréhender l'influence du taux de reflux R et du nombre d'étages théoriques (*N.E.T.*) sur les performances de séparation. Deux fichiers ont été développés pour étudier un fonctionnement à taux de reflux fixe ou variable.

Structure du programme

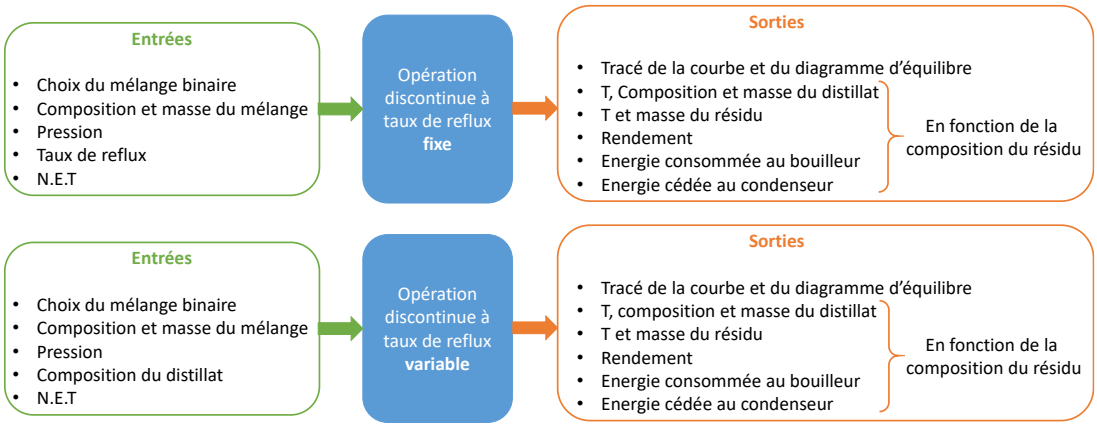

Figure 1 : Entrées et sorties du simulateur.

La Figure 1 résume quelles sont les entrées au choix de l'utilisateur, ainsi que les données de sortie ressorties par le simulateur. Le fichier Excel comporte une base de données contenant les propriétés (enthalpie de vaporisation, coefficient de la loi d'Antoine, etc.) de plusieurs composés organiques (alcools, alcane, etc.) permettant notamment d'établir le diagramme et la courbe d'équilibre du mélange binaire idéal choisi. Une fois les conditions d'entrée choisies, l'utilisateur lance en un clic une macro permettant de débuter les calculs. Sur une des feuilles du fichier, la fraction molaire du résidu (x_F) est discrétisée, ligne par ligne, depuis la valeur initiale vers 0, par pas de 0,005. En colonne, les fractions molaires du reflux (x_i) et de la vapeur (y_i) au niveau de chaque étages théoriques i successifs sont représentées. y_i est déduit de x_i sur chaque plateau d'après les données d'équilibre liquide-vapeur. La valeur de x_{i+1} est ensuite déduite de l'équation suivante établie par Mc-Cabe et Thiele (et permettant la construction de la droite opératoire dans la méthode graphique) :

$y_i = x_{i+1} \times \frac{R}{1+R} + \frac{x_D}{1+R}$ avec R le taux de reflux et x_D la fraction molaire des vapeurs de tête (distillat)

L'utilisation du solveur Excel permet la résolution numérique de ce jeu d'équations sur chaque ligne:

- En déterminant la valeur de x_D, pour R, *N.E.T.* et x_F connus à taux de reflux fixe ;
- En déterminant la valeur de R, pour x_D, *N.E.T.* et x_F connus à taux de reflux variable.

Après la résolution de ces équations, une autre feuille synthétise le calcul du rendement, des énergies consommées/cédées, des températures du bouilleur et des vapeurs de tête, etc. (Fig. 2).

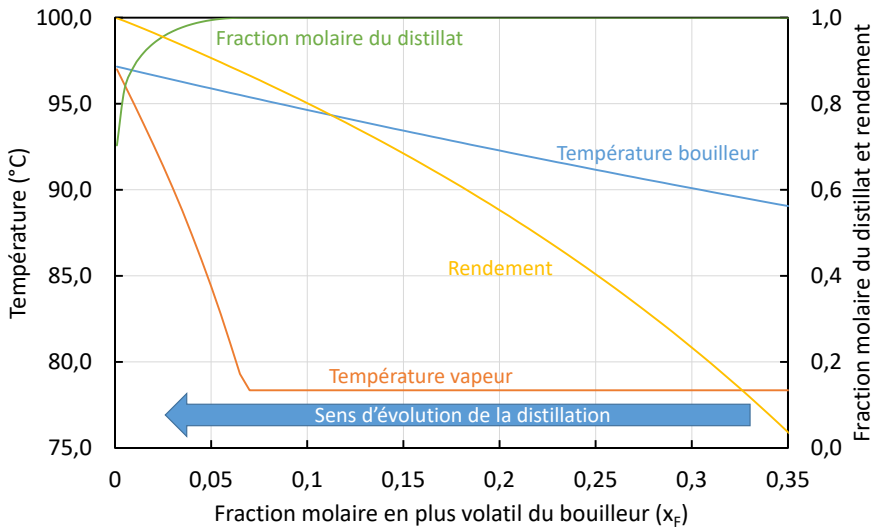

Figure 2 : Exemple de résultat retourné par le simulateur (mélange éthanol/propanol à 36% molaire en éthanol, R = 15, *N.E.T.* = 19, P = 1 bar).

Exploitation du fichier par les étudiants

En séance de TP, les étudiants auront un cahier des charges à leur disposition (nature du mélange, masse et composition initiales, rendement et pureté du distillat souhaités). Ils auront l'objectif de trouver un dimensionnement optimisé répondant à ce cahier des charges, en faisant varier le taux de reflux, la pression, le *N.E.T.* et le mode de gestion du taux de reflux. Cela leur permettra ainsi d'appréhender l'influence de chacun de ces paramètres. A titre d'exemple, la simulation réalisée avec les conditions de la Figure 2 est optimale pour atteindre un rendement de 95% et une fraction molaire du distillat en éthanol de 95%. Dans ce cas, les utilisateurs peuvent en conclure qu'il faudrait arrêter la rectification lorsque le bouilleur ne contient plus que 2,5% d'éthanol en mol, ce qui correspond à une température du bouilleur de 96,5°C.