

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université 8 Mai 1945 – Guelma

Faculté de
Département de

Réf:...../2025



MEMOIRE

Présenté pour l'obtention du diplôme de **Master** Académique

Domaine: Science et technologie.

Filière: Génie des procédés.

Spécialité: Technologie des procédés d'hydrogène vert

Thème

Analyse et simulation des procédés de production d'hydrogène

Par: Guerfi Fadia

Ghenanoua Nedjla

Sous la direction de : **Dr. Bouraghda Yahya**

Année Universitaire : 2024/2025



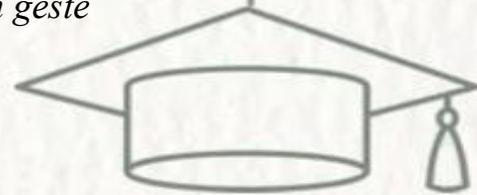
Remerciements:

*Avant tout, nous exprimons notre profonde gratitude envers **Allah**, source de toute connaissance et de toute force, qui nous a guidées et soutenues tout au long de ce travail.*

*Nous souhaitons ensuite adresser nos sincères remerciements à notre encadreur, **Dr Bouraghda Yehya**, pour sa disponibilité, son accompagnement constant, ses conseils avisés et son encadrement rigoureux. Sa bienveillance, sa patience et ses orientations précieuses ont été essentielles à l'aboutissement de ce mémoire. Qu'il trouve ici l'expression de notre profonde reconnaissance.*

*Nos remerciements vont également à **l'ensemble du corps enseignant** qui nous a accompagnées tout au long de notre parcours universitaire, en partageant avec nous leur savoir, leur expérience et leur passion.*

*Enfin, nous remercions chaleureusement **toutes les personnes**, de près ou de loin, qui nous ont soutenues durant la réalisation de ce mémoire, ne serait-ce que par un mot d'encouragement ou un geste bienveillant.*



Dédicace

Je dédie ce modeste travail :

Louange à Dieu, en premier et en dernier,

Qui m'a guidée, soutenue, et facilité le chemin

De la connaissance et de la persévérance.

À mon cher père, qui a toujours été mon soutien et

Mon appui, À ma chère mère, source d'amour

Et de prières, merci à vous deux

Pour tout l'amour et les sacrifices que vous avez faits,

C'est grâce à vous que je suis arrivée à ce stade.

*À mes chers frères et sœurs : **Mohamed El Amine, Meriem et***

***Lylia**, vous êtes mes compagnons de route et les plus proches de*

mon cœur, ce succès est le fruit de votre soutien et de vos

encouragements constants.

*À ma collègue et complice de ce parcours académique, **Fadia***
***Guerfi**, merci pour chaque instant de coopération et de patience*

que tu as partagé avec moi.

Ce travail est l'aboutissement de mes efforts dans la spécialité
Technologie des procédés de l'hydrogène vert – Promotion 2025,
avec l'espoir qu'il soit le début d'un avenir professionnel
prometteur.

Genanoua Nedjla

Dédicace

Je dédie ce modeste travail :

*À mes chers parents, **Rabeh Gerfi**, mon pilier, qui m'a élevée avec sagesse, soutenue avec amour et foi tout au long de ma vie que Dieu lui accorde longue vie et santé et **Khemissa Gerfi**, mon ange gardien, cette femme exceptionnelle qui a enduré la douleur pour m'épargner la souffrance, qui n'a jamais refusé une seule de mes demandes, et qui a toujours été une source inépuisable d tendresses et de force.*

Je leur dédie ce travail avec un amour et une reconnaissance que les mots ne sauraient exprimer pleinement.

*À ma source de force et de bonheur, mon frère **Monire** et mes sœurs **Manel, Maissa et Ritaje**, pour leur soutien constant leurs encouragements et leur présence apaisante, surtout durant mes années universitaires. À mes neveux et nièces bien-aimés, les enfants de ma sœur : **Anas, Arwa et Sondos**, qui illuminent ma vie par leur affection, leur innocence et leur joie.*

*À mes amies proches : **Amel, Aya et Salsabil**, avec qui j'ai partagé des moments inoubliables, de rires, de défis et de précieux souvenirs.*

*À ma binôme et partenaire de projet **Nedjla, Ghenanoua** pour son soutien moral, sa patience et sa gentillesse tout au long de cette réalisation. Ce succès est aussi le sien.*

*Enfin, à tous les étudiants de la promotion **Master Hydrogène Vert 2024-2025**, avec qui j'ai eu l'honneur de vivre cette belle aventure académique.*

Fadia Guerfi

Résumé :

Cette étude vise à simuler la chaîne de production et de liquéfaction du méthane et de l'hydrogène à partir de la biomasse en utilisant le logiciel Aspen Plus. Le travail a été divisé en étapes principales: la gazéification de la biomasse pour produire du gaz méthane, la production de méthane par gazéification, la production d'hydrogène soit par reformage à la vapeur du méthane, soit par fermentation sombre biologique, la liquéfaction des deux gaz par des cycles de refroidissement thermique .La simulation a montré que le reformage à la vapeur offre un meilleur rendement en hydrogène, tandis que la fermentation sombre présente une consommation énergétique plus faible. L'étude se conclut par une comparaison globale des méthodes en termes de rendement, d'impact environnemental et de faisabilité.

Mots clés: Aspen plus simulation, hydrogène, méthane, gazéification, fermentation, liquéfaction, reformage.

Abstract:

This study aims to simulate the production and liquefaction chain of methane and hydrogen from biomass using Aspen Plus software. The work is divided into key stages: biomass gasification for methane production, methane generation via gasification, hydrogen production either through steam methane reforming or dark biological fermentation, gas liquefaction using thermal cooling cycles. The simulation showed that steam reforming yields higher hydrogen output, while dark fermentation is more energy-efficient. The study concludes with a comprehensive comparison of the methods in terms of efficiency, environmental impact, and feasibility.

Keywords : Aspen Plus, simulation, hydrogène, méthane, gasification, fermentation, liquéfaction, reforming.

ملخص:

تهدف هذه الدراسة إلى محاكاة سلسلة إنتاج الميثان والهيدروجين من الكتلة الحيوية باستخدام برنامج اسبن بلوس وتسهيلهما: تم تقسيم العمل إلى مراحل رئيسية تغويز الكتلة الحيوية لإنتاج غاز الميثان إنتاج الميثان عبر التغويز إنتاج الهيدروجين إما عبر الإصلاح البخاري للميثان أو التخمير المظلم الحيوي تمييع الغازين باستخدام دورات تبريد حرارية أظهرت المحاكاة أن الإصلاح البخاري يعطي مردوداً أكبر للهيدروجين، بينما يتميز التخمير المظلم بانخفاض استهلاك الطاقة. وتُختتم الدراسة بمقارنة شاملة بين الطرق من حيث الكفاءة، الأثر البيئي، وقابلية التطبيق.

الكلمات المفتاحية: محاكاة، هيدروجين، ميثان، تغويز، تخمير، تمييع، إصلاح، اسبن بلوس .

Sommaire:

Résumé.....	I
Liste des figures.....	II
Liste des tableaux.....	III
Liste d'abréviations.....	IV
I. Introduction général.....	1
 Chapitre I: Généralités sur l'hydrogène et simulation du procédé de production	
I.1 Introduction.....	4
I.2. Propriétés physico-chimiques de l'hydrogène.....	4
I.3. Avantages et défis de l'hydrogène comme vecteur énergétique.....	4
I.4. Applications actuelles et retenties de l'hydrogène.....	5
I.5. Perspectives pour une économie de l'hydrogène.....	5
I.6. La simulation.....	5
I.7.Types de simulation et applications dans les procédés biotechnologiques.....	6
I.7.1. Simulation des procédés.....	6
I.7.2 Simulation dynamique et cinétique.....	6
I.7.3 Simulation multiphysique.....	6

I.8. Conclusion :	7
-------------------------	---

Chapitre II: Production d'hydrogène à partir de la biomasse et du méthane

II.1 Introduction	9
II.2. Partie 1 : Production du méthane par gazéification, Conversion en hydrogène et liquéfaction du méthane	9
II.2.1. Gazéification de la biomasse.....	9
II.2.2. Reformage a la vapeur du méthane (SMR).....	10
II.2.3. Liquéfaction des productions gazeux.....	12
II.3. Partie 2 : Production d'hydrogène à partir de la biomasse par fermentation sombre.....	14
II.3.1. Fermentation sombre.....	14
II.3.2. Liquéfaction de l'hydrogène	15
II.4. Conclusion	17

Chapitre III : Introduction à la simulation des procédés et l'outil Aspen Plus

III.1. Introduction	19
III.2. Définition de la simulation	19
III.3. Principes de fonctionnement et rôle des simulateurs	19
III.4. Objectifs de la simulation.....	20

III.5. Utilisation de la simulation.....	20
III.6. Présentation du simulation Aspen plus.....	21
III.6.1. Simulation avec Aspen Plus : Pourquoi le choix d'Aspen Plus ?.....	21
III.6.2. Définition.....	21
III.6.3. Caractéristiques principale d'Aspen plus.....	21
III.7. Les étapes de simulation	23
III.8. La palette de modelés.....	27
III.8.1. Réacteurs (Reactors).....	27
III.8.2. Mixers / splitter.....	28
III.8.3. Echangeurs de chaleur (Heat échangeurs).....	28
III.8.4. Séparateurs.....	28
III.8.5. Colonnes (Columns).....	29
III.8.6. Pressure changeurs (modification de pression).....	29

Chapitre IV: Résultats et discussion

IV.1. Aspen plus simulation	31
IV.1.1. Configuration de la simulation	31
IV.1.2. Présentation détaillée des étapes du procédés	37
IV.1.2.1. Voie 1 : Production du méthane par gazéification, Conversion en hydrogène et liquéfaction du méthane	37

IV.1.2.1.1. Etape 1: gazéification de la biomasse pour la production de méthane	37
IV.1.2.1.2. Etape 2: Production de l'hydrogène à partir le méthane reformage à la vapeur (SMR).....	54
IV.1.2.1.3. Etape 3: Liquéfaction de méthane	58
IV.1.2.2. Voie 2: Production de l'hydrogène par fermentation sombre.....	61
IV.1.3. Schéma global d'intégration des quatre étapes	67
IV.1.3.1. Chainage des étapes et définition des flux de matière pour la Voie 1...67	
IV.1.3.1.1. Première étape: Gazéification de la biomasse.....	67
IV.1.3.1.2. Deuxième étape: Production d'hydrogène à partir du méthane.....	67
IV.1.3.1.3. Troisième étape: Liquéfaction de méthane	68
IV.1.3.2. Chainage des étapes et définition des flux de matière pour la Voie 2	68
IV.1.3.2.1. Première étape: Production biologique d'hydrogène par fermentation sombre.....	68
IV.1.3.2.2. Deuxième étape: Liquéfaction de l'hydrogène.....	69
IV.2. Résultats.....	71
IV.2.1. Analyse et comparaison des différentes étapes de production	90
IV.2.1.1. Production de méthane à partir de la biomasse.....	90
IV.2.1.2. Liquéfaction du méthane	91
IV.2.1.3. Production d'hydrogène à partir du méthane	91
IV.2.1.4. Production directe d'hydrogène à partir de la biomasse.....	91

IV.2.2. Résumer des données (en kg / h) et comparaison selon des critères clés.....	92
IV .2.3. Perspectives de recherche et améliorations possibles de la fermentation sombre pour la production d'hydrogène.....	94
IV.4. Conclusion	96
V. Conclusion générale	101
Référence bibliographiques.....	103

Liste des figures:

Chapitre III :

Figure (III. 1): Start Aspen plus.	25
Figure (III. 2) : Interface de démarrage « propriété ».	25
Figure (III. 3) : propriétés_ input component.	26
Figure (III. 4) : Méthodes.....	26
Figure (III. 5) : Thermodynamique Model –PENG-Rob.	27
Figure (III. 6): Interface de simulation.....	27
Figure (III. 7): Types des réacteurs.....	28
Figure (III. 8): Types des mixers/splitter.	29
Figure (III. 9): Types des heat exchangers.....	29
Figure (III. 10) : Types des Séparateurs.....	29
Figure (III. 11) : Types des colonnes.....	30
Figure (III. 12): Types des Modificateurs de pression.....	30

Chapitre IV:

Figure (IV. 1) : Simulation Open Aspen Plus.....	32
Figure (IV.2) : Fenêtre Aspen Plus avec feuille de flux	32
Figure (IV.3) : Spécification des unités	33
Figure (IV.4) : Sélection des composants	33
Figure (IV.5) : Ajoutés les composants	34
Figure (IV.6) : Binary interaction.	34
Figure (IV.7) : Méthode de sélection des propriétés physiques.....	35
Figure (IV.8) : Méthode «Peng-Rob» choisie.....	35
Figure (IV.9) : Propriétés de biomasse (enthalpie).....	36
Figure (IV.10) : Propriétés de ash (enthalpie).	36
Figure (IV.11) : Placer RYield sur le schéma.	38
Figure (IV.12) : Spécifications du bloc « RYield » (P, T).....	38

Figure (IV.13) : Spécifications d'RYield en débit de composition.....	39
Figure (IV.14) : Spécifications d'RYield -ASH (PROXANAL en fraction massique).	39
Figure (IV.15) : Spécifications d'RYield -ASH (ULTANAL en fraction massique).	40
Figure (IV.16) : Spécifications d'RYield -ASH (SULFANAL en fraction massique).	40
Figure (IV.17) : Spécification ssplit(solide).	41
Figure (IV.18) : Spécification ssplit (gaz)	42
Figure (IV.19) : Configuration des réactions.	43
Figure (IV. 20) : Taux de réaction selon la loi de puissance.....	43
Figure (IV.21) : Spécification du type de réaction.	44
Figure (IV.22) : Spécification des réactifs et des produits pour la réaction N°1(OXI).	45
Figure (IV.23) : Spécification des paramètres cinétiques de la réaction N°1(OXI).	45
Figure (IV.24) : Spécification des réactifs et des produits pour la réaction N°2 (OXI).	46
Figure (IV.25) : Spécification des paramètres cinétiques de la réaction. N°2 (OXI).....	47
Figure (IV.26) : Spécification des réactifs et des produits pour la réaction N°1.	47
Figure (IV.27) : Spécification des paramètres cinétiques de la réaction N°1.....	48
Figure (IV.28) : Spécification des réactifs et des produits pour la réaction N°2.	48
Figure (IV.29) : Spécification des paramètres cinétiques de la réaction N°2.....	49
Figure (IV.30) : Spécification des réactifs et des produits pour la réaction N°3.	49
Figure (IV.31) : Spécification des paramètres cinétiques de la réaction N°3.....	50
Figure (IV.32) : Spécification des réactifs et des produits pour la réaction N°4.	50
Figure (IV.33) : Spécification des paramètres cinétiques de la réaction N°4.....	51
Figure (IV.34) : Spécification de SEP (METHANE(Vapeur).	52
Figure (IV.35) : Spécification SEP (CH4 liquide).....	52
Figure (IV. 36) : Connexion de feed et bloc RYield.....	53
Figure (IV. 37) : Propriétés d'FEED (biomass) T, P et de débit de composition et la mass fraction (SULFANAL).	53
Figure (IV.38) : Propriétés de T, P et de débit de composition et la mass fraction de biomass (Proxanal)	53
Figure (IV. 39) : Propriétés de T, P et de débit de composition et la mass fraction de biomass (ULTANAL).	54
Figure (IV.40) : Diagramme fina de l'étaps 1.....	54

Figure (IV.41) : Procédes de vaporeformage de méthane.	55
Figure (IV. 42) : Spécification des réactifs et des produits pour la réaction.....	56
Figure (IV.43) : Spécification de sep (PER).....	57
Figure (IV.44) : Diagramme fina de l'étaps 2 (production de l'hydrogène à partir méthane).	58
Figure (IV.45): Spécification de sep.....	59
Figure (IV. 46): Spécification de sep.....	60
Figure (IV.47) : Spécification de flash2.	60
Figure (IV.48) : Diagramme fine de l'étape 3 (liquéfaction de méthane).	61
Figure (IV.49) : Spécification des réactifs et des produits pour la réaction.....	63
Figure (IV. 50) : Spécification des réactifs et des produits pour la réaction.....	63
Figure (IV.51) : Spécification des réactifs et des produits pour la réaction.....	64
Figure (IV.52): Spécification de SEP (HYDROGENE).....	65
Figure (IV.53) : Spécification des réactifs et des produits pour la réaction.....	66
Figure (IV.54) : Diagramme de Production d'hydrogène par fermentation sombre	67
Figure (IV.55) : Diagramme final.....	69
Figure (IV.56) : Exécution de la simulation	70
Figure (IV.57) : Résultats de flux	88
Figure (IV.58) : Résultats.	90
Figure (IV.59) : Comparaison des quantités produites par voie (Kg /h)	94
Figure (IV.60) : Comparaison qualitative des différentes voies	95
Figure (IV.61) : Diagramme de liquéfaction de l'hydrogène	71

Liste des tableaux

Chapitre II:

Tableau (II.1): Conditions opératoires de Gazéification de la biomasse	9
Tableau (II. 2): Conditions opératoires reformage à la vapeur du méthane (SMR)	11
Tableau (II.3): Comparaison des méthodes principales d'hydrogène à partir du méthane de production.....	13
Tableau (II.4): Les Conditions opératoires.....	13
Tableau (II.5) : Conditions opératoires fermentation sombre	15
Tableau (II.6) : Conditions opératoires liquéfaction de l'hydrogène	17

Chapitre IV:

Tableau (IV. 1) : Spécifications de RGIBBS.....	41
Tableau (IV. 2): Spécification de RPlug 1.....	42
Tableau (IV. 3): spécification de RPlug 2.....	51
Tableau (IV. 4): spécification de heater.....	51
Tableau (IV. 5): spécification de REQuil	56
Tableau (IV. 6): spécification de flash 2.....	57
Tableau (IV. 7) : spécification de HEATER.....	57
Tableau (IV. 8): spécification de HEATER 1	59
Tableau (IV. 9): spécification de HEATER 2.....	59
Tableau (IV. 10): spécification de compresseur.....	61
Tableau (IV. 11): spécification de pump.....	62
Tableau (IV. 12): spécification <i>de</i> HEATER 1.....	62
Tableau (IV. 13): spécification de HEATER 2.....	62
Tableau (IV. 14): spécification de RSTIOC 1.....	62
Tableau (IV. 15): spécification de RGIBBS.....	63
Tableau (IV. 16): spécification de RSTOIC 2.....	63
Tableau (IV. 17): spécification de heater 3.....	64
Tableau (IV. 18): spécification de RSTOIC 3.....	64

Tableau (IV. 19): spécification de heater 4.....	64
Tableau (IV. 20): spécification de FLASH 2.	65
Tableau (IV. 21): spécification de heater 5.....	65
Tableau (IV. 22): spécification de heater 6.....	66
Tableau (IV. 23): spécification de RSTOIC 4	66
Tableau (IV. 24) : spécification de HEATER 7.....	66
Tableau (IV. 25) : Résumé des données	93
Tableau (IV. 26) : Comparatif des différentes voies étudiées.....	94

Liste d'abréviations:

ASPEN PLUS: Advanced System for Process Engineering – Logiciel de simulation des procédés

OPEX : Operating Expenditures". Dépenses d'exploitation.

CAPEX : Capital Expenditures – Dépenses d'investissement.

SMR : Steam Methane Reforming – Reformage à la vapeur du méthane.

POX : Partial Oxidation – Oxydation partielle.

ATR: Auto thermal Reforming – Reformage autothermique.

CH₄ : Méthane.

H₂ : Hydrogène.

CO : Monoxyde de carbone.

CO₂ : Dioxyde de carbone.

C : Carbone.

He: Helium.

Cl₂: Dichlorure.

P-H: Para hydrogène.

M: La masse en Kg.

SI: Unité du Système international.

ASH : Cendres résiduelles (Non-Conventionnel Solid dans Aspen Plus).

N₀ , N₁, N₂ N₃ N₄: Étapes ou numérotation des réactions chimiques.

OXI : Oxydation.

RED : Réduction.

GNL : Gaz Naturel Liquéfié.

N₂ : Diazote (azote moléculaire).

O₂ : Dioxygène.

I_BUTAN : Isobutane (C₄H₁₀, isomère ramifié).

N_BUTANE : n-Butane (C₄H₁₀, isomère linéaire).

CSTR : Continuos Stirred-Tank Réactors – Réacteur parfaitement agité.

RYIELD : Réacteur à rendement dans Aspen Plus.

RSTOIC : Réacteur stœchiométrique dans Aspen Plus.

RGIBBS : Réacteur à équilibre de Gibbs dans Aspen Plus.

REQUIL : Réacteur à équilibre chimique dans Aspen Plus.

SEP : Séparateur.

FLASH : Séparateur vapeur-liquide instantané.

HEATER : Réchauffeur ou échangeur de chaleur.

PENG-ROB : Peng-Robinson – Modèle thermodynamique.

SRK: Soave-Redlich-Kwang – Modèle thermodynamique.

NRTL : Non-Random Two Liquide – Modèle thermodynamique.

T : Température en kelvins.

P : Pression en bar ou atm.

METCBAR : Unités métriques avec pression exprimée en bar (standard utilisé dans Aspen Plus).

METSPEC: Metric Units for Specialty Chemicals Applications.

Introduction

générale

I. Introduction générale:

L'humanité est aujourd'hui confrontée à des défis énergétiques croissants liés à l'épuisement des ressources fossiles, à l'augmentation de la demande énergétique mondiale et aux enjeux environnementaux tels que les émissions de gaz à effet de serre et le changement climatique [1].

Dans ce contexte, la transition énergétique mondiale vise à réduire la dépendance aux combustibles fossiles en adoptant des sources d'énergie durables et respectueuses de l'environnement. L'hydrogène se présente comme une solution prometteuse, notamment en tant que vecteur énergétique propre, capable de jouer un rôle clé dans le stockage de l'énergie et la décarbonation des secteurs industriels, énergétiques et des transports [2]. Actuellement, la majorité de l'hydrogène est encore produite à partir de ressources fossiles, ce qui engendre des émissions importantes de CO_2 . Cependant, plusieurs voies alternatives ont émergé grâce aux progrès technologiques, notamment la gazéification, l'électrolyse à base d'énergies renouvelables, et la valorisation de la biomasse par fermentation ou méthanisation [3].

Dans cette optique, le recours à des outils de simulation numérique permet d'analyser et de comparer rigoureusement les performances de ces différentes voies. Malgré la diversité des voies de production d'hydrogène et les avancées technologiques récentes, il demeure difficile d'identifier les filières les plus efficaces, durables et adaptées à une mise en œuvre à grande échelle, notamment lorsqu'il s'agit de valoriser la biomasse. La complexité des procédés thermochimiques et biologiques, ainsi que l'interdépendance de nombreux paramètres (rendement, émissions, consommation énergétique, etc.), nécessitent une approche rigoureuse d'analyse et de modélisation. Dans ce contexte, une question centrale se pose : quelles sont les performances comparées des voies de fermentation sombre et de reformage du méthane issu de la biomasse, en termes de production d'hydrogène, d'impact environnemental et de faisabilité industrielle ? Pour y répondre, ce travail s'appuiera sur des simulations numériques via le logiciel Aspen Plus, afin de reproduire les conditions opérationnelles réelles et d'évaluer chaque procédé.

Parmi ces options, la biomasse se distingue comme une ressource renouvelable

Abondante, capable de produire de l'hydrogène à travers divers procédés. Ce mémoire se concentre principalement sur deux voies : la fermentation sombre, produisant directement de l'hydrogène, et le reformage du méthane pour obtenir de l'hydrogène. Ce méthane est lui-même généré par la gazéification de la biomasse, ce qui confère au procédé une dimension renouvelable et circulaire.

L'objectif est de modéliser et comparer ces deux procédés à l'aide de simulations numériques réalisées avec le logiciel Aspen Plus, un outil de référence en ingénierie chimique permettant de reproduire fidèlement le comportement des procédés thermochimiques complexes [4]. Cette approche vise à évaluer les performances de chaque voie en termes de rendement en hydrogène, d'impact environnemental, et de faisabilité industrielle, afin d'identifier la solution la plus efficace, durable et applicable à grande échelle.

CHAPITRE I:

Généralités sur l'hydrogène et simulation du procédé de production

I.1 Introduction:

Avec l'essor des énergies renouvelables et la nécessité de réduire les émissions de gaz à effet de serre, l'hydrogène s'impose comme un vecteur énergétique propre et prometteur. Pour exploiter pleinement son potentiel, il est essentiel de comprendre ses propriétés, ses applications, ainsi que les défis liés à sa production, son stockage et sa distribution. Parallèlement, la simulation numérique s'avère un outil indispensable pour l'étude, la conception et l'optimisation des procédés liés à l'hydrogène.

I.2. Propriétés physico-chimiques de l'hydrogène:

L'hydrogène (H_2) est l'élément chimique le plus léger et le plus abondant de l'univers. À température ambiante et pression atmosphérique, il se présente sous forme de gaz incolore, inodore et non toxique. Sa masse molaire est de 2,016 g/mol, et il possède une densité énergétique massique élevée, atteignant environ 120 MJ/kg sur la base du pouvoir calorifique inférieur (PCI), ce qui en fait le carburant avec la plus haute énergie par unité de masse. Cependant, sa densité énergétique volumique est faible, environ 8 MJ/L pour l'hydrogène liquide et 5,6 MJ/L pour le gaz comprimé à 700 bar, comparé à 32 MJ/L pour l'essence. Cette faible densité volumique pose des défis pour son stockage et son transport [5] [6].

I.3. Avantages et défis de l'hydrogène comme vecteur énergétique:

L'hydrogène est considéré comme un vecteur énergétique propre, car sa combustion ne produit que de l'eau, sans émissions de CO_2 ni de polluants atmosphériques. Il peut être produit à partir de diverses sources, y compris l'eau et les énergies renouvelables, ce qui le rend potentiellement durable. Cependant, plusieurs défis subsistent :

Production : Actuellement, la majorité de l'hydrogène est produite à partir de combustibles fossiles, notamment par reformage du méthane, ce qui génère des émissions de CO_2 .

Stockage et transport : En raison de sa faible densité volumique, le stockage de l'hydrogène nécessite des pressions élevées ou des températures cryogéniques, augmentant les coûts et les risques associés.

Infrastructure : Le développement d'une infrastructure adaptée pour la distribution et l'utilisation de l'hydrogène est encore limité, nécessitant des investissements importants [7] [8].

I.4.Applications actuelles et potentielles de l'hydrogène:

L'hydrogène trouve des applications variées dans plusieurs secteurs. Dans le transport, il est utilisé dans les piles à combustible pour véhicules, offrant une autonomie comparable à celle des voitures à essence, avec en plus un temps de recharge réduit. Dans le secteur industriel, l'hydrogène intervient notamment dans la production d'ammoniac, le raffinage du pétrole et la fabrication de métaux. Enfin, pour le stockage d'énergie, il permet de conserver l'énergie produite par des sources renouvelables intermittentes, telles que l'éolien et le solaire, sous forme chimique [9] [10].

I.5.Perspectives pour une économie de l'hydrogène:

Le développement d'une économie de l'hydrogène nécessite des avancées technologiques majeures ainsi que des politiques de soutien efficaces. L'hydrogène vert, produit par électrolyse de l'eau à partir de sources d'énergie renouvelables, permet de réduire significativement l'empreinte carbone. Par ailleurs, la mise en place d'initiatives gouvernementales et l'implication des investissements privés sont essentielles pour développer les infrastructures nécessaires et faire baisser les coûts de production. Enfin, la recherche et l'innovation dans les technologies de production, de stockage et de distribution de l'hydrogène sont des éléments clés pour assurer la compétitivité de cette filière à long terme [11][12].

I .6. La Simulation:

La simulation est une méthode puissante qui permet de représenter, analyser et prévoir le comportement de systèmes physiques, chimiques ou biologiques complexes, sans réaliser d'expérimentations coûteuses ou difficiles. Elle joue un rôle clé dans l'ingénierie et la recherche, notamment dans les secteurs énergétiques, pour optimiser les processus, tester différents scénarios, et concevoir de nouvelles technologies.

Elle repose sur la formulation de modèles mathématiques représentant les phénomènes étudiés, qui peuvent inclure les transferts de chaleur, les réactions chimiques, les dynamiques fluides, ou encore les interactions biologiques [13] [14].

Les simulations permettent de réduire le coût des expérimentations et d'améliorer la compréhension des procédés, mais leur exactitude dépend de la qualité des données et de la complexité des systèmes biologiques modélisés [20].

I.7. Types de simulation et applications dans les procédés biotechnologiques :

I.7.1 Simulation des procédés:

Elle est utilisée pour modéliser les bilans matière et énergie dans les procédés industriels, permettant ainsi de prédire la performance globale de l'unité de production et d'optimiser ses conditions d'exploitation. Des logiciels comme Aspen Plus et HYSYS sont couramment utilisés à cet effet [13].

I.7.2 Simulation dynamique et cinétique:

Cette simulation vise à modéliser des phénomènes évoluant dans le temps, tels que les réactions chimiques et biologiques, afin d'étudier la cinétique et la stabilité des systèmes. Les logiciels MATLAB et Simulink sont souvent employés pour ces modèles [16].

I.7.3 Simulation multiphysique:

Elle intègre plusieurs phénomènes physiques (transfert de chaleur, mécanique des fluides, réactions chimiques) dans un seul modèle, ce qui permet l'étude de systèmes complexes et multi-échelles. COMSOL Multiphysics est un logiciel couramment utilisé pour ce type de simulation [17].

I.7.4 Simulation dans les procédés biotechnologiques:

Cette simulation se concentre sur la modélisation des réactions biochimiques et la croissance microbienne, dans le but d'améliorer la productivité et la stabilité des procédés biologiques. Les modèles mathématiques reposent sur des équations différentielles décrivant la consommation des substrats et la production des composés. Les logiciels Aspen Plus pour la modélisation intégrée, MATLAB pour la modélisation cinétique et dynamique, et COMSOL pour l'analyse multiphysique dans les bioréacteurs sont utilisés [18] [19] [20].

I.8. Conclusion:

Ce chapitre a présenté les généralités sur l'hydrogène, mettant en lumière ses propriétés, ses avantages et les défis liés à son utilisation comme vecteur énergétique. Par ailleurs, l'importance croissante de la simulation dans l'étude et l'optimisation des systèmes liés à l'hydrogène a été soulignée, avec une classification des principaux types de simulation et des outils associés. Ces connaissances fondamentales constituent une base essentielle pour aborder les chapitres suivants consacrés aux différentes voies de production et à la modélisation des procédés hydrogène.

Chapitre II:

**Production d'hydrogène à
partir de la biomasse et du
méthane**

II.1 Introduction :

L'hydrogène est considéré comme un vecteur énergétique propre et durable. Sa production peut s'appuyer sur plusieurs procédés utilisant différentes sources, notamment le méthane et la biomasse. Ce chapitre présente en détail deux grandes voies de production : la gazéification de la biomasse pour produire du méthane, suivi de la production d'hydrogène à partir de ce méthane, puis la liquéfaction finale de l'hydrogène pour son stockage et son transport. Les conditions opératoires et les paramètres techniques essentiels de chaque étape sont décrits avec leurs avantages, limites, et références académiques associées.

II.2. Partie 1 : Production du méthane par gazéification, conversion en hydrogène et liquéfaction du dihydrogène :

II.2.1. Gazéification de la biomasse:

Définition:

La gazéification est un procédé thermochimique qui convertit la biomasse en un gaz de synthèse (sungas) contenant principalement du CO, H₂, CO₂, et CH₄, sous l'action d'un agent gazéifiant (vapeur, air, ou oxygène) à haute température (800–1000 °C) [21].

Conditions opératoires :

Tableau (II.1): Conditions opératoires de Gazéification de la biomasse

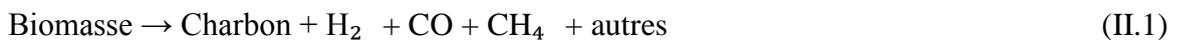
Paramètre	Valeur typique	Description	Référence
Température	800–1000 °C	Température optimale de la gazéification	[21]
Pression	1–5 bar	Pression du réacteur	[22]
Agent gazéifiant	Vapeur d'eau, air, O ₂	Influence sur la composition du gaz	[21]
Temps de séjour	1–5 secondes	Durée des réactions dans le gazéificateur	[22]
Conversion	70–90% biomasse	Rendement de conversion en gaz	[21]

La biomasse est introduite dans le gazéificateur où elle subit une série de réactions endothermiques. Le gaz de synthèse produit est ensuite traité pour enrichir sa teneur en méthane via des procédés additionnels comme la méthanation.

Réactions principales dans la gazéification:

Les réactions clés sont :

- Pyrolyse :



- Oxydation partielle :



- Réduction (réaction de Boudouard) :



- Réaction de gaz à l'eau (Water-Gas Réaction) :



- Méthanation (réaction de Sabatier) :



Technologies utilisées:

- Gazéificateurs à lit fluidisé : très utilisés pour un bon mélange et contrôle de température.
- Gazéificateurs à lit fixe (updraft/downdraft) : production plus élevée de CH_4 dans certains cas.
- Gazéificateurs à flux entraîné (entrained flow) : adaptés aux grandes échelles mais peu favorables à CH_4 [21].

II.2.2. Reformage à la vapeur du méthane (SMR):

Définition:

Le reformage à la vapeur est un procédé catalytique où le méthane réagit avec la vapeur d'eau à haute température (700–1000 °C) pour produire de l'hydrogène et du monoxyde de carbone, suivi

d'une réaction de conversion du gaz à l'eau (water-gas shift) pour maximiser la production d'hydrogène [24].

Conditions opératoires :

Tableau (II. 2): Conditions opératoires reformage à la vapeur du méthane (SMR) [24].

Paramètre	Valeur typique	Description
Température	700–1000 °C	Température du reformage
Pression	20–30 bar	Pression opératoire
Ratio vapeur/méthane	2.5–3.5	Rapport vapeur/méthane
Catalyseur	Ni-basé; sur Al ₂ O ₃	Catalyseur utilisé
Rendement hydrogène	70–85%	Conversion en hydrogène

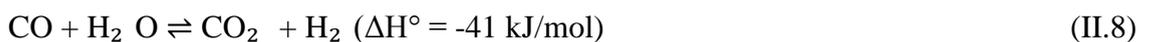
Le SMR est la méthode la plus répandue pour produire de l'hydrogène industriel. Le gaz produit est généralement purifié par lavage et séparation (PSA) pour obtenir de l'hydrogène de haute pureté [24].

➤ C'est la méthode la plus utilisée industriellement (environ 50% de l'hydrogène mondial).

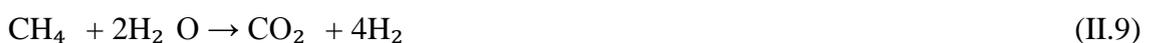
- Réaction principale :



- Réaction secondaire (Shift) :



- Réaction globale :

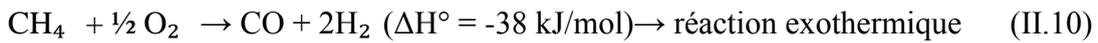


Des autres méthodes principales d'hydrogène à partir du méthane de production:

Oxydation partielle du méthane (Partial Oxidation – POX) :

Cette méthode utilise l'oxygène ou l'air pour convertir le méthane en gaz de synthèse.

- Réaction principale :



- Conditions opératoires :
 - Température : 1000–1500 °C
 - Pression : 1–10 bar
 - Catalyseur : platine (Pt), rhodium (Rh) [25].

B. Reformage autothermic (Auto thermal Reforming – ATR):

Méthode combinant SMR + POX dans un même réacteur pour équilibrer la chaleur.

- Réactions :
 - $\text{CH}_4 + \frac{1}{2} \text{O}_2 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO} + 3\text{H}_2 \dots\dots\dots (\text{II.11})$
 - puis $\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2 \dots\dots\dots (\text{II.12})$
- Conditions opératoires :
 - Température : 850–1100 °C
 - Pression : 10–30 bar
 - Catalyseur : Ni/AlO₃ ou Rh [26].

Comparaison des technologies:

Tableau (II.3): Comparaison des méthodes principales d'hydrogène à partir du méthane de production.

Méthode	Température (°C)	Pression (bar)	Catalyseur	Rendement H ₂	Avantages
SMR	700–950	3–25	Ni/Al ₂ O ₃	Élevé	Mature, bien connue
POX	1000–1500	1–10	Pt, Rh	Moyen	Rapide, exothermique
ATR	850–1100	10–30	Ni ou Rh	Très élevé	Équilibre thermique

II.2.3. Liquéfaction des produits gazeux:

Définition :

Procédé à cycle simple (Single Mixed Réfrigérant – SMR). Le méthane produit est partiellement liquéfié pour faciliter son stockage et transport. La liquéfaction consiste à refroidir le méthane à environ -162 °C Utilise un mélange de réfrigérants (N₂ , CH₄ , C₂ H₆ , C₃ H₈), réduisant ainsi son volume de près de 600 fois [27]. Efficace pour des débits moyens ou petits. [29]

Conditions opératoires :

Tableau (II.4): Les Conditions opératoires.

Paramètre	Valeur typique	Description	Réf
Température	-160 à -162 °C	Température de liquéfaction du méthane	[27]
Pression	4 à 6 bar	Pression pendant le refroidissement	[28]
Fraction liquéfiée	40% - 60%	Part du méthane convertie en liquide	[27]
Consommation énergétique	0,25 à 0,5kWh/Nm ³	Energie nécessaire par unité de méthane	[28]

Objectif industriel:

- Réduire le volume du gaz de 600 fois pour le transport maritime.

- Méthane liquéfié = GNL (Gaz Naturel Liquéfié)
- Utilisé pour l'exportation, les terminaux GNL, et le stockage.

Des autres procédés de liquéfaction du méthane:

Les procédés de liquéfaction du gaz naturel peuvent être classés en différentes catégories selon leur complexité et leur efficacité énergétique. Le procédé à cycle en cascade repose sur l'utilisation successive de plusieurs réfrigérants purs — généralement le propane, l'éthane, puis le méthane disposé en cascade, chaque fluide servant à condenser le suivant. Cette configuration permet d'optimiser le transfert de chaleur et d'améliorer considérablement le rendement du processus, en particulier à grande échelle. C'est pourquoi ce procédé est largement adopté dans les installations industrielles de grande capacité, notamment par des acteurs majeurs comme ExxonMobil à travers le procédé C3/MR. En parallèle, le procédé expansé utilise une turbine de détente pour abaisser la température du gaz par effet Joule-Thomson. Bien qu'il soit généralement moins efficace sur le plan énergétique que les cycles en cascade, il se distingue par sa simplicité de mise en œuvre, ce qui le rend adapté aux petites installations ou aux unités mobiles où la compacité et la facilité d'exploitation priment sur la performance thermique. [30].

II.3. Partie 2 : Production d'hydrogène à partir de la biomasse par fermentation sombre:

II.3.1. Fermentation sombre:

Définition:

La fermentation sombre est un procédé biologique anaérobie où des micro-organismes dégradent la biomasse (matière organique) en absence de lumière pour produire de l'hydrogène, ainsi que d'autres sous-produits tels que l'acide acétique, le CO₂ et le méthane. Ce procédé se déroule généralement à des températures modérées (30–60 °C) et est considéré comme une voie prometteuse de production durable d'hydrogène [31].

Conditions opératoires :

Tableau (II.5) : Conditions opératoires fermentation sombre [31]

Paramètre	Valeur typique	Description
Température	30–60 °C	Température optimale pour la fermentation
pH	5.5–6.5	pH optimal pour l'activité microbienne
Temps de fermentation	12–48 heures	Durée nécessaire pour une production efficace
Substrat	Résidus organiques, déchets agricoles	Matière première utilisée
Production d'hydrogène	1.5–3.5 mol H ₂ /mol substrat	Rendement selon la nature du substrat

Substrats utilisés:

- Glucose, amidon, cellulose hydrolysée
- Déchets de cuisine, boues d'épuration, déchets agricoles
- Jus de canne, mélasse, glycérine (déchets de biodiesel) [32].

Micro-organismes impliqués :

- Genres courants: *Clostridium*, *Enterobacter*, *Bacillus*, *Thermoanaerobacterium*
- Conditions anaérobies, pas besoin de lumière (\neq fermentation photo) [34].

Rendement en hydrogène et facteurs limitants :

Le rendement théorique de la fermentation sombre est de 4 mol H₂ /mol glucose, mais le rendement réel est souvent inférieur à cause de la formation d'autres produits (acides, alcool, etc.) [35]. Des facteurs comme l'accumulation d'acides ou une mauvaise régulation du pH peuvent limiter la production.

Explication:

Les microorganismes fermentent la biomasse en absence d'oxygène, produisant de l'hydrogène dans un bioréacteur. Ce procédé est particulièrement intéressant pour valoriser des déchets organiques à faible coût, réduisant ainsi l'impact environnemental.

II.3.2. Liquéfaction de l'hydrogène:

Définition:

L'hydrogène produit par reformage est liquéfié à environ -253 °C (20 K) pour stockage et transport efficace, car son volume est ainsi réduit d'environ 800 fois [36].

Objectif de la liquéfaction de l'hydrogène :

La liquéfaction vise à réduire considérablement le volume de l'hydrogène gazeux afin de le transporter ou de le stocker à haute densité.

- Hydrogène gazeux à 1 atm et 25 °C → très faible densité ($0,0899\text{ kg/m}^3$)
- Hydrogène liquide à -253 °C → densité $\sim 70.8\text{ kg/m}^3$
- Nécessaire pour les applications dans :
 - Les lanceurs spatiaux (ex. SpaceX, Ariane)
 - Les stations de ravitaillement
 - Le stockage énergétique à haute capacité [37].

Conditions opératoires :

Tableau (II.6) : Conditions opératoires liquéfaction de l'hydrogène

Paramètre	Valeur typique	Description	Réf
Température	~ -253 °C (20 K)	Température de liquéfaction de l'hydrogène	[36]
Pression	1 à 5 bar	Pression pendant liquéfaction	[38]
Consommation énergétique	10 à 15 kWh/kg H ₂	<ul style="list-style-type: none"> • Très élevée comparée à d'autres gaz : <ul style="list-style-type: none"> ○ Liquéfier 1 kg H₂ → 10 à 15 kWh/kg ○ Ce qui représente 30 à 40 % de l'énergie contenue dans le H₂ • À comparer avec le méthane (~0,9 kWh/kg) 	Energie nécessaire pour liquéfier 1 kg d'hydrogène [36][38]
Rendement global	70% - 80%	Rendement énergétique du processus complet	[38]

Problèmes techniques spécifiques:

- Nécessite des matériaux cryogéniques (acier inoxydable, aluminium)
- L'hydrogène peut diffuser à travers les parois (problème d'étanchéité)
- Perte d'hydrogène par évaporation (boil-off)
- Nécessité de transformer l'hydrogène ortho (75 %) → para (25 %) pour éviter les pertes thermiques
- Réaction catalytique nécessaire avec Fe O₃ , Cr O₃ [39]

II.4. Conclusion:

Ce chapitre a présenté un panorama détaillé des principales voies de production de l'hydrogène, en mettant l'accent sur deux grandes catégories :

Les procédés thermochimiques et biologiques. La gazéification de la biomasse permet une valorisation énergétique des déchets organiques tout en produisant un gaz de méthane, contribuant ainsi à une économie circulaire. Le reformage à la vapeur du méthane (SMR) demeure la méthode industrielle la plus répandue, offrant une production d'hydrogène à grande échelle mais avec des émissions de CO₂ significatives

La fermentation sombre représente une voie biologique prometteuse pour produire de l'hydrogène à partir de biomasses résiduelles, en exploitant l'action de micro-organismes dans des conditions anaérobies et modérées. Enfin, les procédés de liquéfaction, bien qu'ils ne produisent pas directement d'hydrogène, jouent un rôle essentiel dans la logistique et le transport de ce vecteur énergétique

Les paramètres opératoires et conditions spécifiques à chaque procédé, tels que la température, la pression et le temps de réaction, ont été détaillés afin de mieux comprendre leur optimisation pour une production efficace et durable.

Ce cadre théorique servira de base pour la modélisation et la simulation des processus dans les chapitres suivants, permettant d'évaluer la performance, les rendements et les contraintes techniques associées à chaque technologie.

Chapitre III:

**Introduction à la simulation
des procédés et l'outil Aspen**

Plus

III.1. Introduction:

Dans le domaine de l'ingénierie des procédés, la simulation et la modélisation sont des outils essentiels pour comprendre, concevoir et optimiser les systèmes industriels. Elles permettent d'analyser un procédé dans des conditions variées sans recourir à des essais expérimentaux coûteux et potentiellement risqués [40]. La modélisation, qu'elle repose sur des relations empiriques ou des lois fondamentales (conservation de la masse, énergie, mouvement, thermodynamique, cinétique chimique), permet de représenter un système réel tout en capturant les phénomènes influents [41]. Le choix du modèle dépend des objectifs de l'étude et des données disponibles.

Parmi les outils numériques, Aspen Plus est un simulateur de procédés très utilisé, permettant de modéliser diverses opérations unitaires (distillation, absorption, réactions chimiques, etc.) grâce à des bases de données thermodynamiques fiables [42]. Il facilite également l'analyse énergétique, économique, les études de sensibilité et l'optimisation des procédés complexes. Grâce à sa flexibilité, Aspen Plus est utilisé dans plusieurs secteurs industriels, tels que la pétrochimie, l'agroalimentaire, la pharmacie et la production d'énergie, permettant aux chercheurs de tester virtuellement différents scénarios avant la mise en œuvre [44].

III.2. Définition de la simulation :

La simulation est un outil essentiel utilisé dans divers domaines de l'ingénierie et de la recherche. Elle permet d'étudier le comportement d'un système avant sa mise en œuvre réelle, en offrant la possibilité d'optimiser son fonctionnement en testant différentes solutions et conditions opératoires. De nombreux simulateurs et codes de calcul ont été développés pour résoudre des problèmes complexes, notamment lorsque le calcul manuel devient impraticable ou trop coûteux en termes de temps et de ressources [45].

III.3. Principes de fonctionnement et rôle des simulateurs:

Les simulateurs de procédés, couramment utilisés dans l'industrie, peuvent être définis comme des outils basés sur des modèles de connaissance. Ils reposent sur la résolution de bilans de masse et d'énergie informations essentielles pour la conception, ainsi que sur des équations d'équilibres thermodynamiques. Ces simulateurs fournissent des de procédés, notamment pour

le dimensionnement des équipements, l'analyse des performances sous différentes conditions opératoires et l'optimisation des procédés.

Ces outils sont principalement utilisés lors de la conception de nouveaux procédés, mais aussi pour l'optimisation de procédés existants et l'évaluation des propriétés physiques des substances impliquées. Un aspect clé de ces simulateurs est leur base de données thermodynamiques, qui contient les propriétés des corps purs et des mélanges. Grâce à ces données, les ingénieurs peuvent, à partir des informations relatives aux corps purs présents dans le procédé et du schéma de procédé, élaborer un modèle du système en utilisant un ensemble d'équations qui décrivent les opérations unitaires, les réactions chimiques, ainsi que les propriétés des substances.

De plus, ces simulateurs peuvent être intégrés à d'autres applications logicielles telles qu'Excel, Visual Basic, ou Matlab, permettant ainsi une plus grande flexibilité et interopérabilité pour l'analyse et la gestion des données [45].

III.4. Objectifs de la simulation:

- Les principaux objectifs de la simulation des procédés sont les suivants :
- Résoudre les équations de bilans de matière et d'énergie pour l'ensemble des équipements du procédé.
- Calculer les caractéristiques des fluides circulant entre les différentes unités (telles que le débit, la composition, la température, la pression et les propriétés physiques).
- Estimer les coûts d'investissement et de fonctionnement, tout en tenant compte des impératifs de développement durable, ainsi que des impacts sur l'environnement et la sécurité.
- Optimiser les conditions de fonctionnement du procédé afin d'améliorer les performances globales [45].

III.5. Utilisation de la simulation:

La simulation est un outil polyvalent utilisé à différentes étapes du cycle de vie des procédés industriels, notamment dans la phase de conception ainsi que dans le suivi en exploitation.

Rôles de la simulation pour atteindre cet objectif:

La simulation joue un rôle essentiel tant dans la conception que dans l'exploitation des unités industrielles. Lors de la phase de conception, elle permet d'établir avec précision les bilans matière et énergie, constituant ainsi la base pour comprendre le déroulement des réactions et les flux de matière dans le système [13]. Elle contribue également au dimensionnement optimal des équipements clés tels que les réacteurs, les échangeurs de chaleur et les colonnes, garantissant ainsi l'efficacité technique et économique du procédé.

En outre, la simulation aide à estimer les coûts d'investissement (CAPEX) et les coûts d'exploitation (OPEX), permettant une analyse économique globale du projet [13]. Pendant la phase d'exploitation, la simulation est utilisée pour ajuster les paramètres opératoires en cas de variations dans la composition de l'alimentation ou dans les conditions de fonctionnement, assurant ainsi la stabilité et la performance du système [50]. Elle permet aussi de comparer les résultats simulés aux données réelles afin d'évaluer les performances de l'unité et de détecter rapidement d'éventuelles déviations [49].

III .6. Présentation du simulateur Aspen Plus:

III.6.1. Simulation avec Aspen Plus: Pourquoi le choix d'Aspen Plus ?

Aspen Plus est un logiciel de simulation de procédés largement utilisé dans l'industrie chimique et biotechnologique grâce à sa capacité à modéliser des systèmes complexes, y compris les bioprocédés. Il offre une interface utilisateur intuitive et des modules adaptés aux réactions biologiques, ce qui en fait un choix privilégié pour la simulation des procédés de production d'hydrogène à partir de déchets organiques [58] [59]. Comparé à d'autres outils, Aspen Plus permet d'intégrer facilement des modèles cinétiques, stœchiométriques et thermodynamiques tout en fournissant des résultats précis et exploitables [60].

III.6.2. Définition:

Aspen Plus est un outil de simulation de procédés utilisé pour modéliser, concevoir, évaluer les performances, optimiser et planifier des procédés en régime permanent. Il est largement appliqué dans les domaines de la chimie, de la chimie fine, de la pétrochimie, et de la métallurgie, permettant d'analyser virtuellement des systèmes complexes tout en intégrant des bases de données thermodynamiques précises [42].

III.6.3. Caractéristiques principales d'Aspen Plus:

Modélisation des opérations unitaires et des courants de matière :

Le logiciel Aspen Plus repose sur une architecture modulaire séquentielle, dans laquelle chaque opération unitaire (réacteur, colonne de distillation, échangeur de chaleur, etc.) est modélisée sous forme d'un module indépendant. Ce module reçoit des conditions d'entrée (telles que le débit, la température, la pression et la composition des flux), puis calcule les conditions de sortie correspondantes en fonction des lois de conservation et des équilibres thermodynamiques [42].

Dans ce cadre, chaque courant de matière est représenté par un vecteur de propriétés contenant les paramètres suivants :

- Les débits partiels de chaque composant (exprimés en kg/h ou mol/h),
- La température (T) et la pression (P) du courant,
- L'enthalpie massique (KJ/Kg) et l'entropie massique (kJ/kg· K),
- Les fractions de vapeur et de liquide,
- Ainsi que la densité du mélange.

Ces données sont essentielles pour garantir la conservation de la matière et de l'énergie dans l'ensemble du procédé simulé [42].

- Classification des sous-courants dans Aspen Plus:

Un courant global peut être subdivisé en plusieurs sous-courants, en fonction de la nature physico-chimique des espèces présentes. Aspen Plus distingue notamment quatre grandes catégories :

➤ MIXED:

Représente un mélange multiphasique, pouvant inclure simultanément des phases liquide, vapeur et solide. Ce type de courant est utilisé dans les opérations complexes comme la distillation ou le séchage.

➤ CONVENTIONAL :

Désigne des composants chimiquement bien définis, pour lesquels une formule moléculaire explicite et des propriétés thermodynamiques précises sont disponibles. Exemples : eau (H_2O), méthane (CH_4), dioxyde de carbone (CO_2) [49].

➤ CISOLID (Conventionnel Inerte Solid):

Regroupe les solides inertes, c'est-à-dire ceux qui ne participent pas aux équilibres de phase. Exemples : silice, sable, matériaux catalytiques solides [42].

➤ NC (Non-Conventionnel):

Concerne les solides complexes ou mal définis chimiquement, ne possédant pas de formule brute explicite. Ce type de courant est typique pour les matériaux naturels ou industriels, comme la biomasse, le charbon ou les résidus solides. Leur traitement dans Aspen nécessite des modèles empiriques spécifiques basés sur des analyses élémentaires (proximité/ultimatum analysais) [53].

➤ Le système de propriétés physiques dans Aspen Plus:

Lors d'une simulation de procédés, les propriétés physiques – qu'il s'agisse de propriétés thermodynamiques (équilibres liquide-vapeur, enthalpie) ou de propriétés de transport (viscosité, conductivité thermique, etc.) – sont indispensables pour le calcul des opérations unitaires ainsi que pour le dimensionnement des équipements.

Dans Aspen Plus, ces propriétés sont évaluées à l'aide d'un système intégré de calcul qui les exprime en fonction des variables d'état telles que la température, la pression et la composition. Ces calculs reposent sur des modèles empiriques ou moléculaires, alimentés par des paramètres issus de banques de données (tels que les coordonnées critiques, les coefficients des équations d'Antoine, etc.).

Le logiciel met à disposition un large éventail de méthodes de calcul des propriétés physiques, regroupées dans des collections de routines qui interagissent directement avec les modèles des opérations unitaires. Ces méthodes incluent, par exemple, NRTL, UNIQUAC, Peng-Robinson, SRK, entre autres.

Le choix approprié du modèle thermodynamique ou des corrélations adaptées au système étudié est une étape cruciale. Ce choix dépend du type de mélange, des phases présentes et des objectifs de simulation, et requiert souvent l'expertise d'un spécialiste en thermodynamique des procédés [42].

III.7. Les étapes de simulation :

Pour une meilleure compréhension de la méthodologie d'une simulation sous ASPEN PLUS, plusieurs étapes sont requises pour réaliser une bonne simulation. Après le lancement du simulateur, l'interface d'ASPEN PLUS semble comme indiquée sur la boîte de dialogue

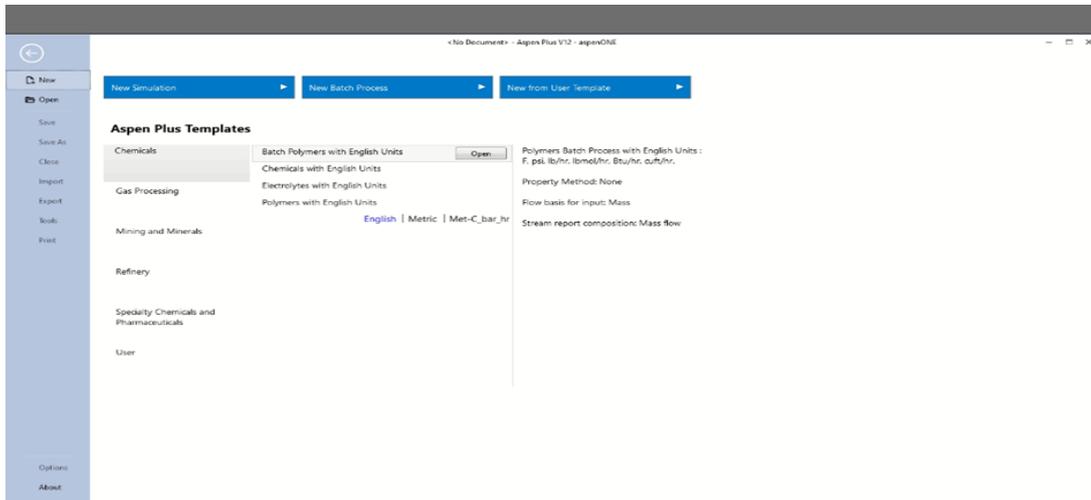


Figure (III. 1): Start Aspen plus.

- 1- Démarrer une nouvelle simulation sous ASPEN PLUS
- 2- Ouvrez ASPEN PLUS, et cliquez sur "New" puis sélectionnez "New simulation"
- 3- commencer avec « propriété setup »

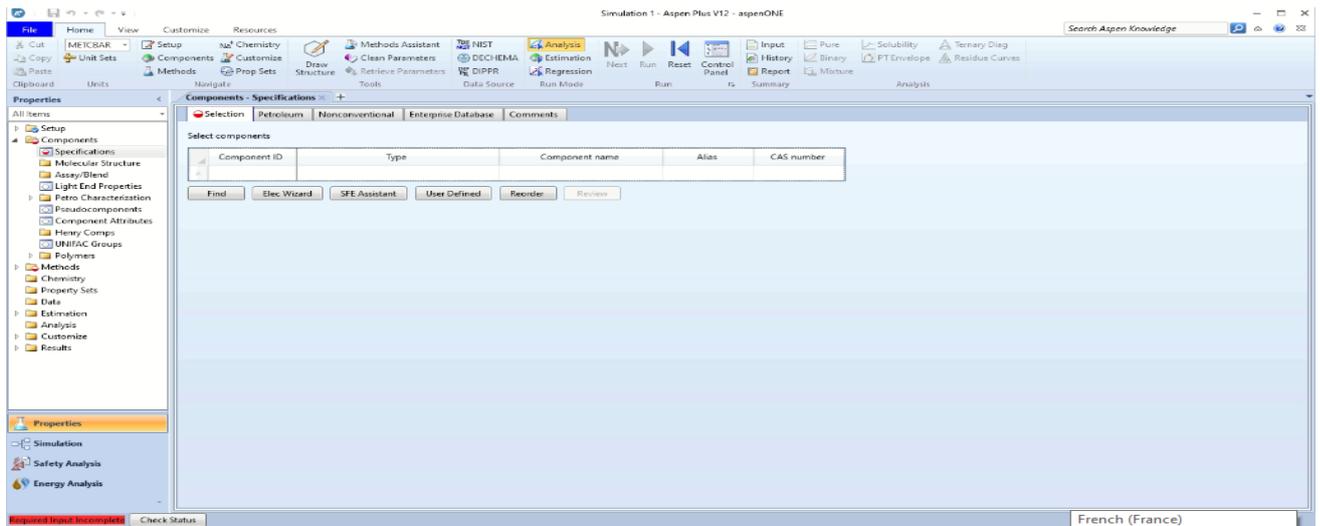


Figure (III. 2) : Interface de démarrage « propriété ».

4- Pour ajouter des composants à la simulation, écrivez les composants dans la case "component ID" pour les ajouter dans le gestionnaire de base de simulation. (FigureIII.3)

5- Cliquez sur "Find" et taper le nom de composant pour faire apparaître la "Vue des composants List" qui est une liste de tous les composants disponibles dans ASPEN PLUS. (FigureIII.3).

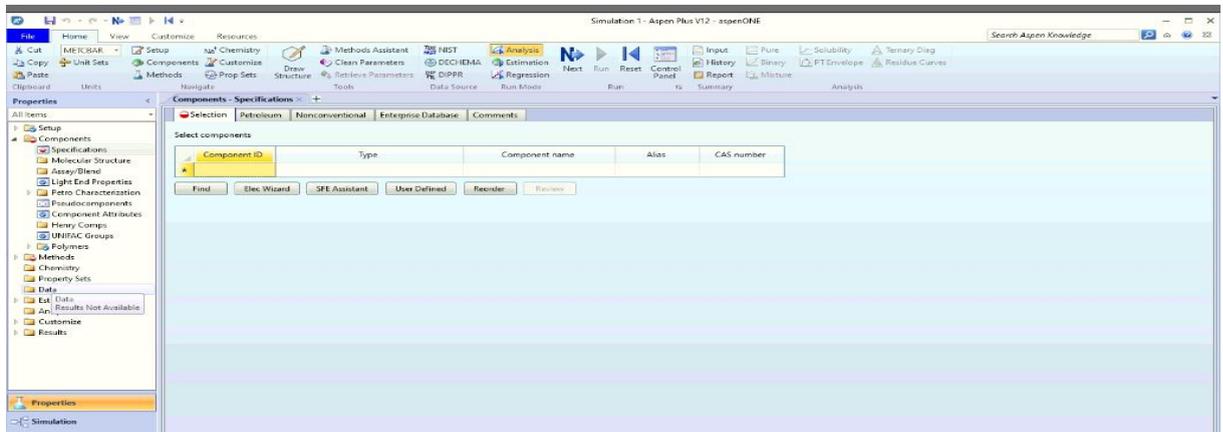


Figure (III. 3) : propriétés_ input component.

6- lorsque tous les composants sont sélectionnés. Fermer la vue Component List.

7- Sélectionnez « Méthodes »

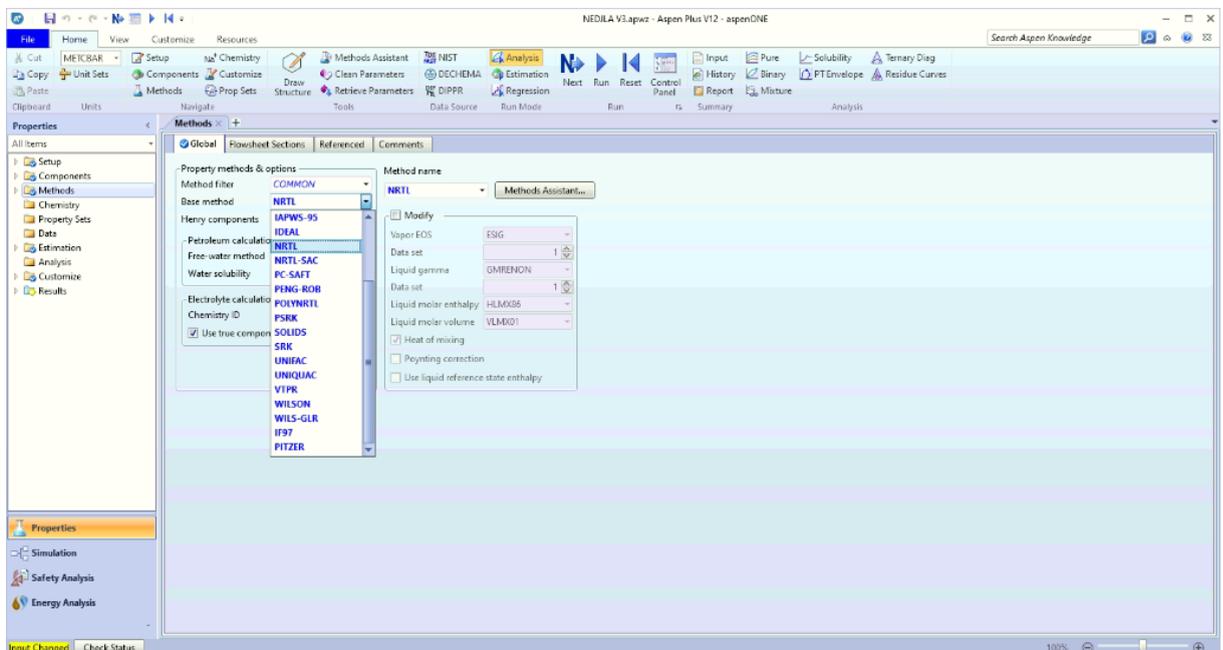


Figure (III. 4) : Méthodes

9- Parmi les modèles proposés, choisi le modèle : PENG-Rob (Figure III.6)

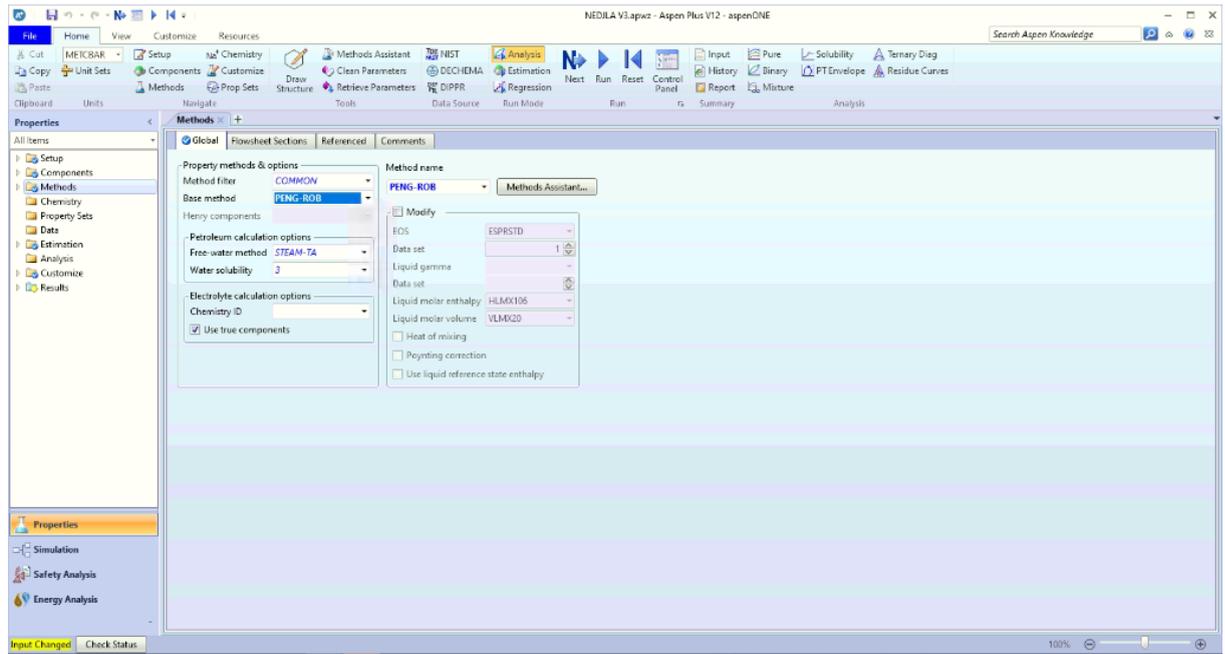


Figure (III. 5) : Thermodynamique Model –PENG-Rob.

10- Une fois le modèle thermodynamique et la composition sont choisies, cliquer sur « Next » deux fois

L'interface se compose de deux parties espace de travail et palette des équipements.

11- Sélectionner «simulation».



Figure (III. 6): Interface de simulation.

- L'interface se compose de deux parties espace de travail et palette des équipements.

11- Sélectionner le flux matériel pour introduire les données de ce dernier.

III.8. La Palette de modèles:

III.8.1. Réacteurs (Réacteurs):

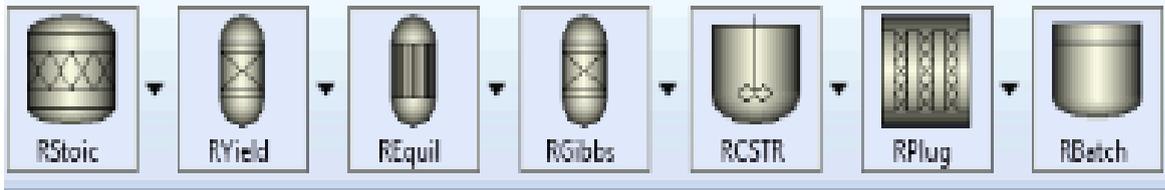


Figure (III. 7): Types des réacteurs.

RStoic : Réacteur basé sur une réaction stœchiométrique fixe, sans cinétique.

RYield : Réacteur qui convertit les réactifs selon un rendement spécifié, sans considération chimique détaillée [54].

RCSTR : Réacteur continu à mélange parfait (CSTR), avec ou sans cinétique de réaction.

RPlug : Réacteur à flux piston (Plug Flow Reactor, PFR), modélise un écoulement sans mélange axial [54].

ReacSep : Réacteur + séparateur en une seule unité [55].

BatchReac : Réacteur discontinu (batch), utilisé pour des procédés par lots [54].

RGibbs: Réacteur calcule l'équilibre chimique en minimisant l'énergie libre de Gibbs, sans nécessiter la définition explicite des réactions [49].

REquil: Réacteur où les réactions atteignent l'équilibre chimique, nécessitant la définition explicite des réactions [57].

III.8.2. Mixers/Splitters:



Figure (III. 8): Types des mixers/splitter.

Mixer : Combine plusieurs flux en un seul flux de sortie.

Splitter : Divise un flux en plusieurs flux selon des fractions définies.

Tee : Division simple d'un flux sans spécifier de fraction (également appelé jonction en T) [56].

III.8.3. Échangeurs de chaleur (Heat Exchangers):



Figure (III. 9) : Types des heat échangeurs.

- Heater : Modèle simple qui chauffe ou refroidit un flux sans échangeur physique détaillé.
- Cooler : Version du Heater uniquement pour le refroidissement [52].
- HeatX : Échangeur de chaleur entre deux flux, avec modélisation énergétique complète.
- Multistream : Échangeur pour plusieurs flux simultanément (très utilisé en génie des procédés) [48].

III.8.4. Séparateurs :



Figure (III. 10) : Types des Séparateurs.

Separator : Sépare un flux en plusieurs composants ou phases selon des fractions spécifiées.

Flash2 : Séparation vapeur-liquide à l'équilibre thermodynamique (flash).

Decanter : Séparation liquide-liquide par gravité (décantation).

Electrolyte Séparateur : Séparation dans les systèmes électrolytiques [47].

III.8.5. Colonnes (Columns):

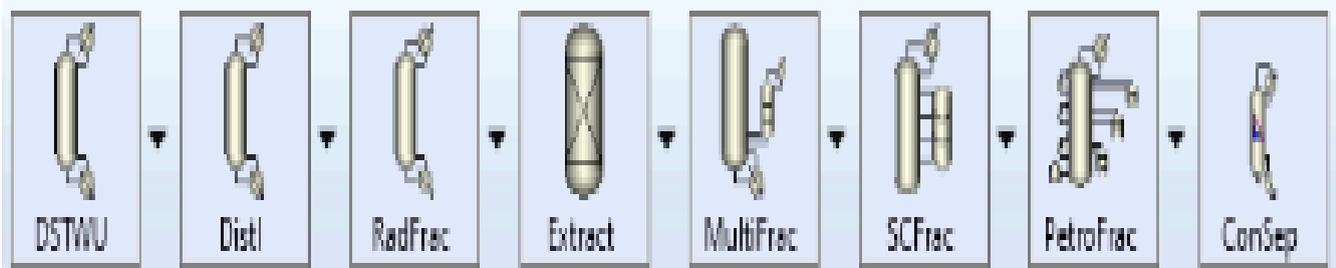


Figure (III. 11) : Types des colonnes

- RadFrac : Modèle rigoureux de distillation, absorption ou extraction (avec équilibre de phase et transfert de masse).
- Shortcut : Colonne de distillation simplifiée (méthode de Fenske-Underwood-Gilliland).
- Extract : Colonne d'extraction liquide-liquide [46].

III. 8.6. Pressure Changeurs (Modificateurs de pression) :



Figure (III. 12): Types des Modificateurs de pression

- Pump : Augmente la pression d'un liquide.
- Compressor : Augmente la pression d'un gaz.
- Valve : Réduit la pression (détente) sans travail mécanique [43].

Chapitre IV:

Résultats et Discussion

IV.1. Aspen Plus simulation :

IV.1.1 Configuration de la simulation :

Cliquez sur "démarrer" et sélectionnez le programme Aspen Plus V12. Ensuite cliquer sur « new », et choisissez «New simulation », (la figure IV.1) et (IV.2).

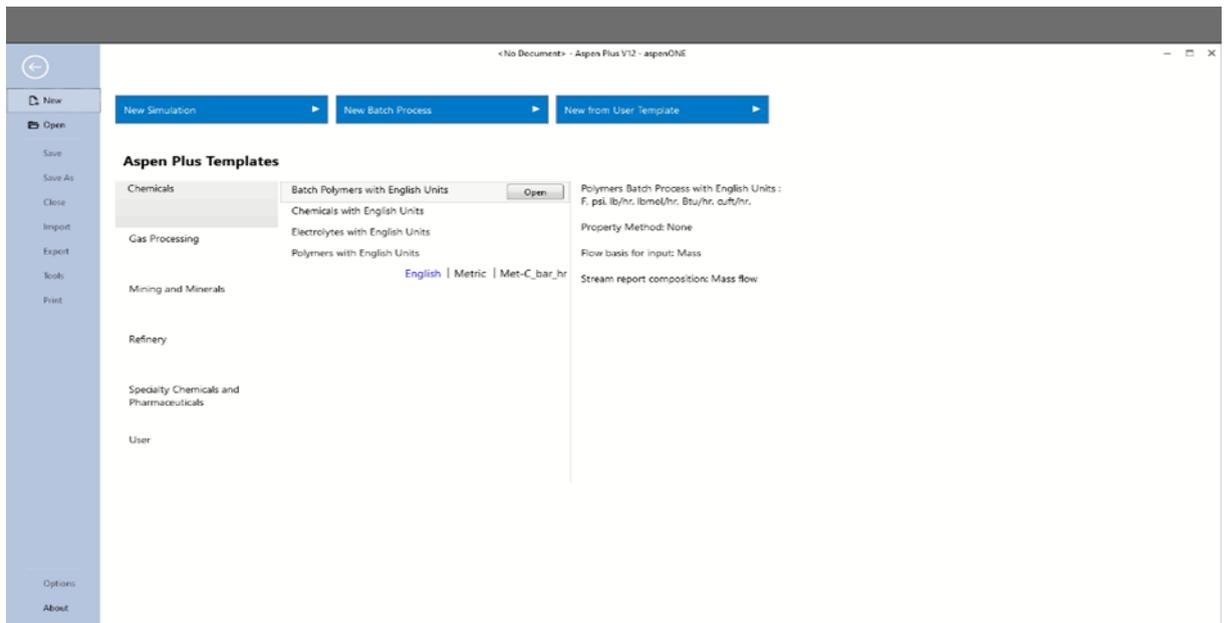


Figure (IV. 1) : Simulation Open Aspen Plus

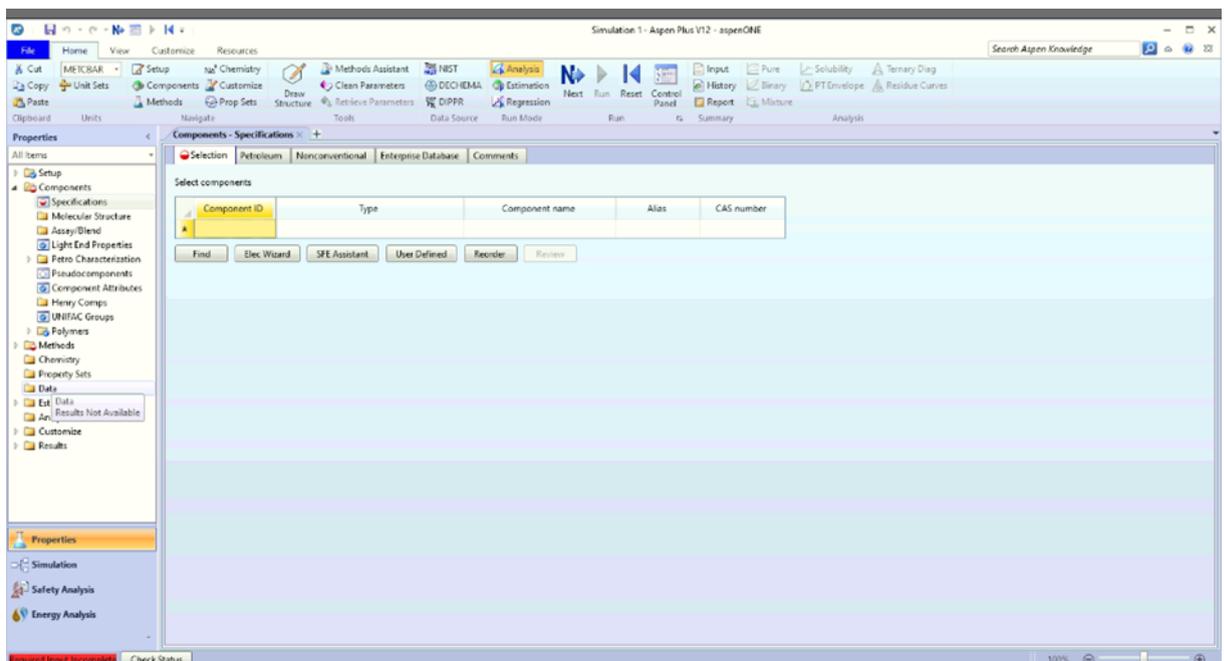


Figure (IV.2) : Fenêtre Aspen Plus avec feuille de flux

Nous modifions les unités en « METSPEC ». Comme le montre sur (la figure IV.3).

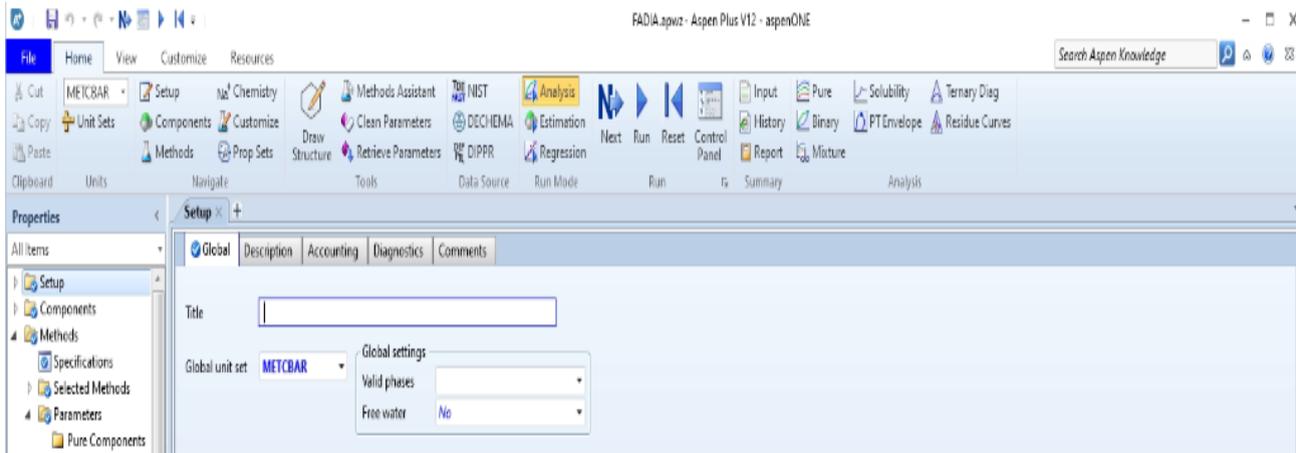


Figure (IV.3) : Spécification des unités

Les composants chimiques qui seront utilisés dans la simulation sont déterminés en cliquant sur Components, Spécifications, et Find. La fenêtre illustrée à (la figure IV.4) s'ouvre. Nous écrivons le nom du composant ou de la formule et cliquons sur "Find now ". Par exemple, si vous avez écrit «méthane », la boîte sous (la figure IV.4) s'ouvre. Cliquez sur "Biomass " et cliquez sur Add. Répétez la procédure pour "ASH"chosier le type "Non conventionnel".Répétez la procédure pour les autres composants ».

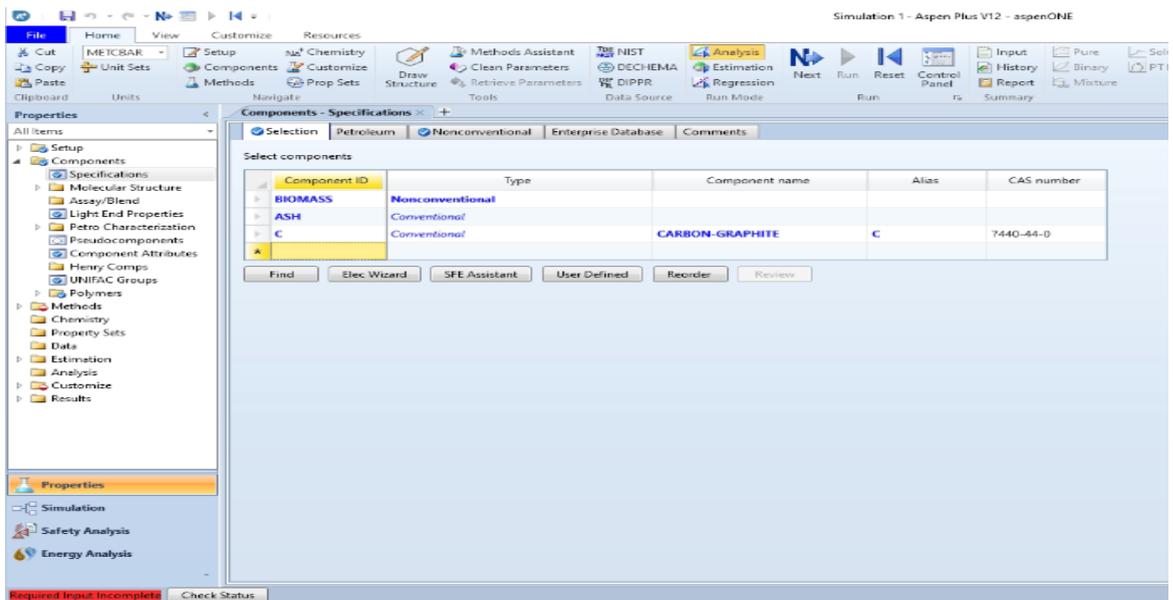


Figure (IV.4) : Sélection des composants

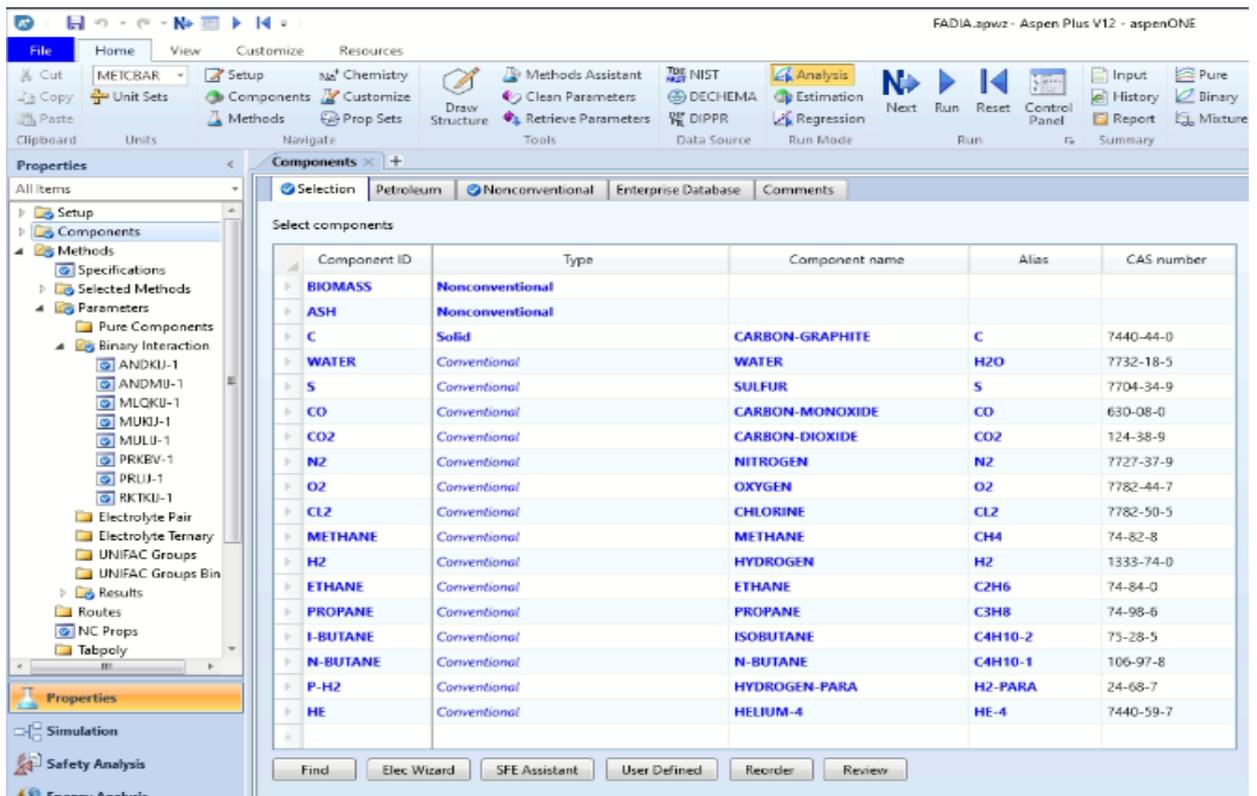


Figure (IV.5) : ajoutés les composants.

- Cliquer Next

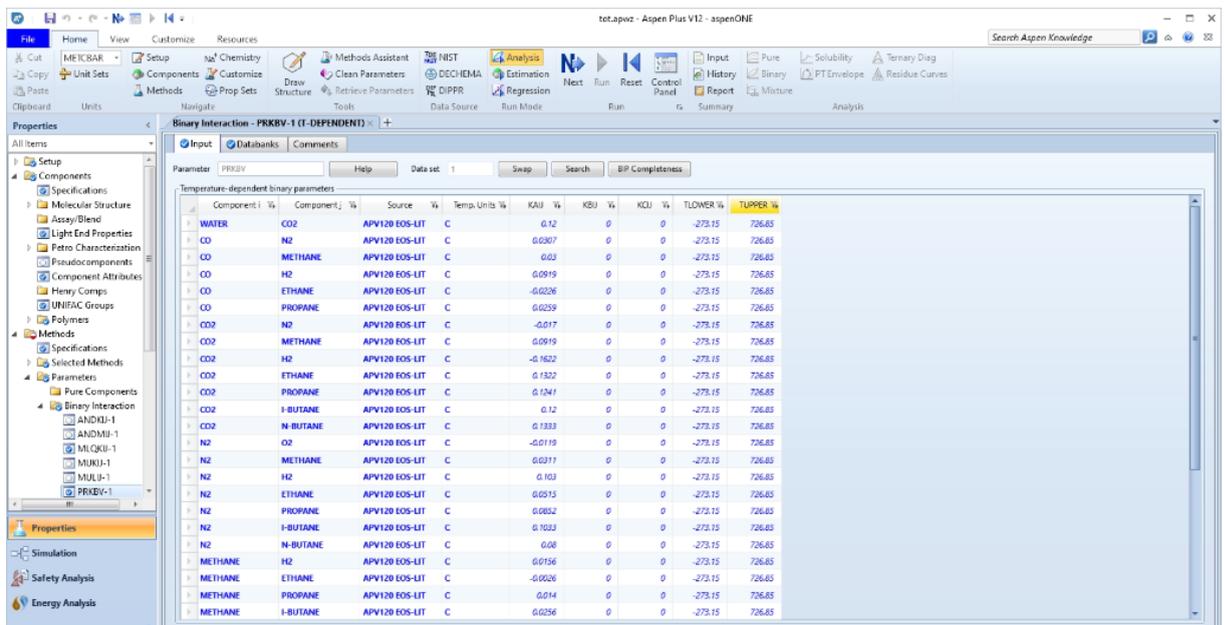


Figure (IV.6) : Binary interaction.

- On peut utiliser « Méthodes Assistant » pour choisir la meilleure méthode.

- Le package de propriétés physiques à utiliser doit être spécifié. « Peng-Rob » est concéder comme le meilleur fonctionne pour équilibres les phases dans des systèmes complexes typiques de la production d'hydrogène, surtout dans des conditions de haute température et pression.
- Cliquez sur Méthodes et Spécifications. Utilisez la flèche déroulante dans Base méthode pour sélectionner «Peng-Rob» comme indiqué sur (la Figure IV.7) et (IV.8)).

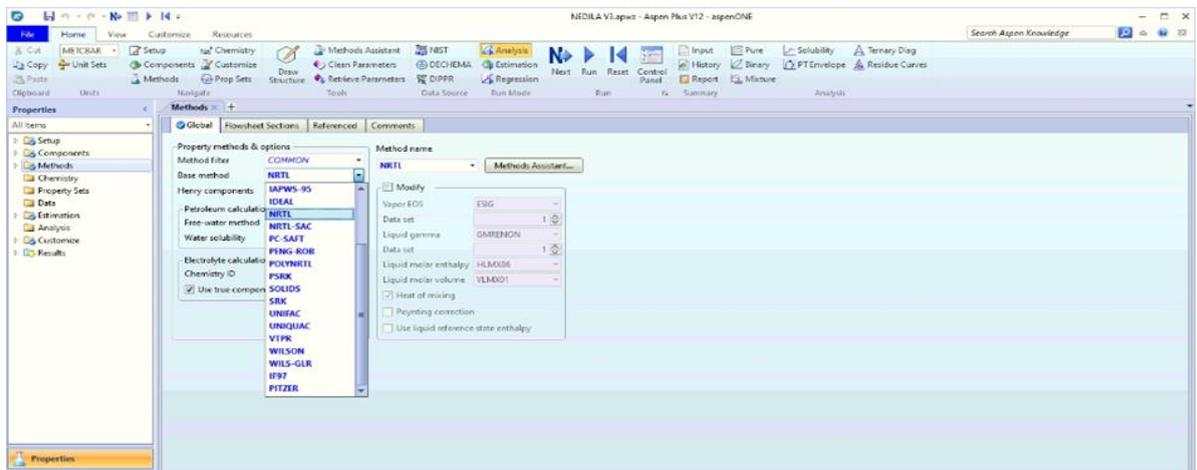


Figure (IV.7) : Méthode de sélection des propriétés physiques.

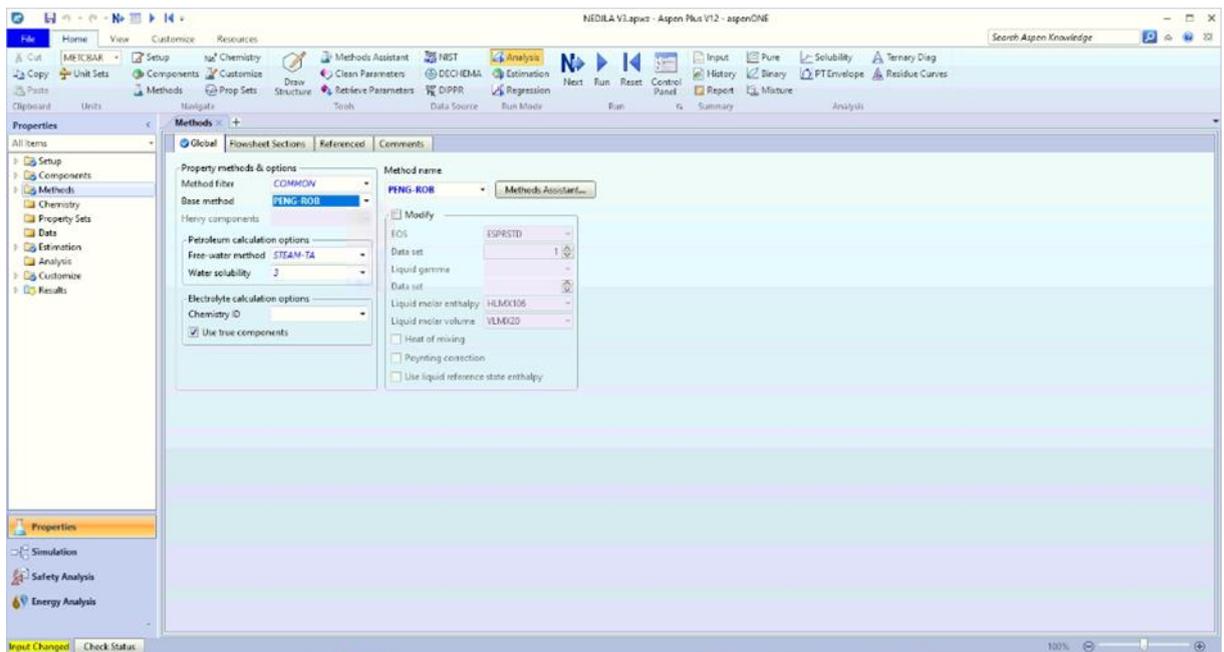


Figure (IV.8) : Méthode «Peng-Rob» choisie.

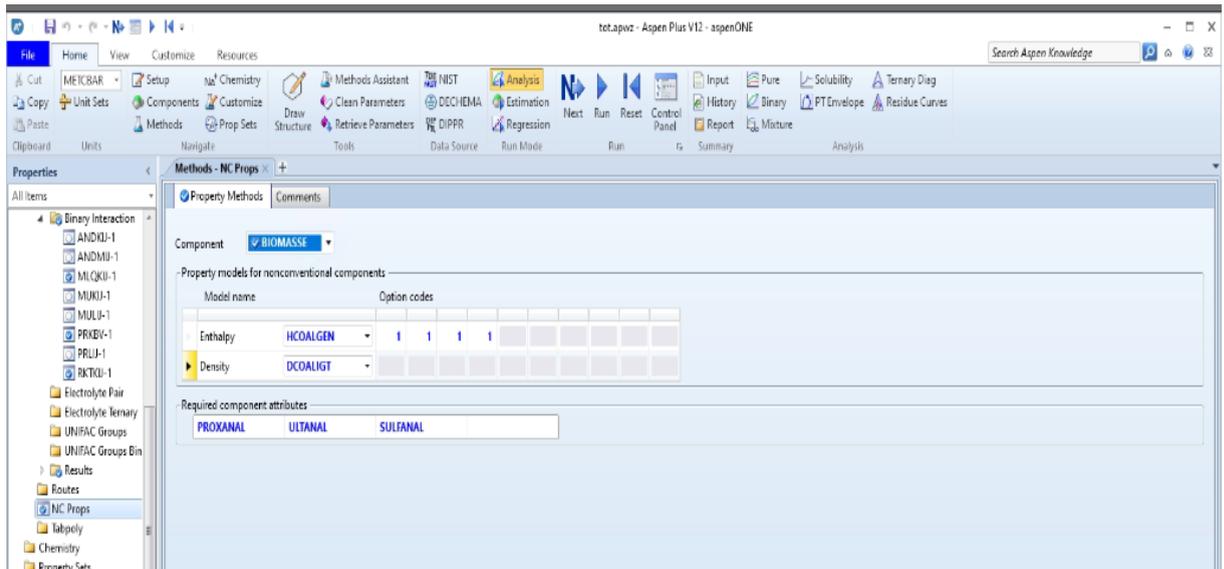


Figure (IV.9) : Propriétés de biomasse (enthalpie).

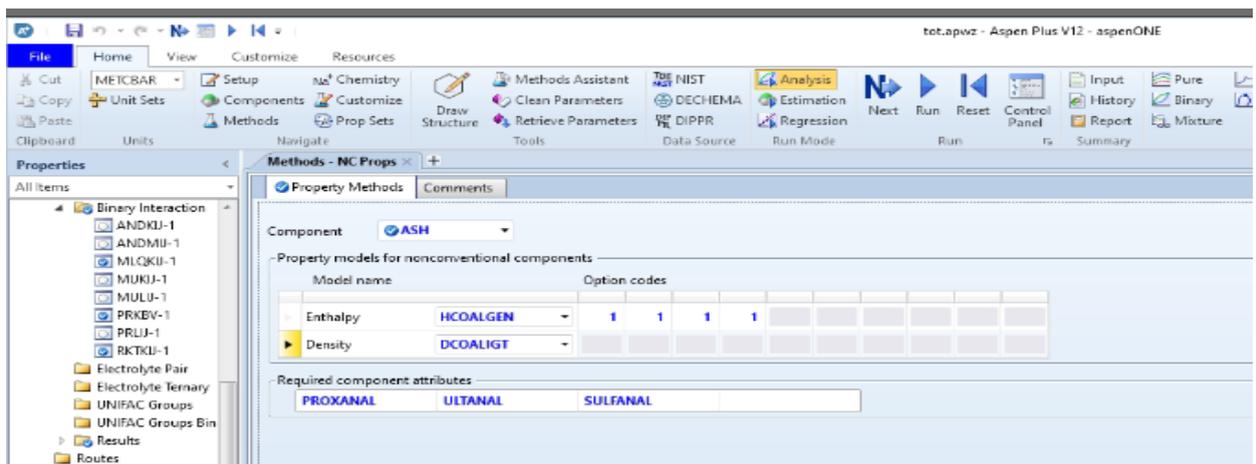


Figure (IV.10) : Propriétés de ash (enthalpie).

- Cliquer next .
- Nous avons maintenant terminé toutes les saisies nécessaires pour commencer notre simulation.

IV.1.2 .Présentation détaillée des étapes du procédé:

Procédé repose sur une chaîne de conversion de la biomasse combinant des opérations thermiques et biologiques. Les trois premières étapes (gazéification, reformage à la vapeur et liquéfaction du méthane) sont thermiques, impliquant des réactions ou des transformations à haute température. En revanche, la quatrième étape,

la fermentation sombre, est un procédé biologique anaérobie permettant la production directe d'hydrogène à température modérée. Cette approche intégrée permet d'évaluer l'efficacité et la complémentarité des différentes voies de valorisation énergétique de la biomasse.

IV.1.2.1. Voie 1 : Production du méthane par gazéification, Conversion en hydrogène et liquéfaction du méthane

IV.1.2.1.1. Étape 1 : Gazéification de la biomasse pour la production de méthane:

Dans cette première étape, la biomasse est convertie thermo chimiquement en gaz de synthèse à travers le procédé de gazéification. Ce procédé se déroule à haute température (800–1000 °C) en présence de vapeur d'eau et/ou d'air, permettant la décomposition des composés organiques en un mélange gazeux riche en CO, H₂, CO₂, CH₄, N₂, .CL₂, H₂O, ASH, BIOMASS et O₂.

La modélisation dans Aspen Plus utilise les unités suivantes :

- L'unité RYIELD a permis de représenter la décomposition primaire de la biomasse.

Au bas de la fenêtre se trouvent des onglets de page pour différentes unités et opérations. Cliquez sur l'onglet de la page "Réacteurs" pour afficher les types de réacteurs alternatifs (Figure IV .13)

Cliquez sur la flèche à droite du type RYield puis, définissez l'un des symboles et déplacez le pointeur sur la feuille de flux vierge. Cliquez sur inserts du schéma de flux RYield (Figure IV.14). De nombreux RYield peuvent être installés en continuant à cliquer sur le schéma de fonctionnement. Pour arrêter d'ajouter des unités, cliquez sur la flèche à gauche au bas de la fenêtre, cela annule le mode d'entrée. Vous pouvez renommer La masse du réacteur en cliquant sur l'icône "Organigramme",

Cliquer sur le bouton droit et sélectionnez R

- Ecrire le nom «DECOUP» cliqué ok.

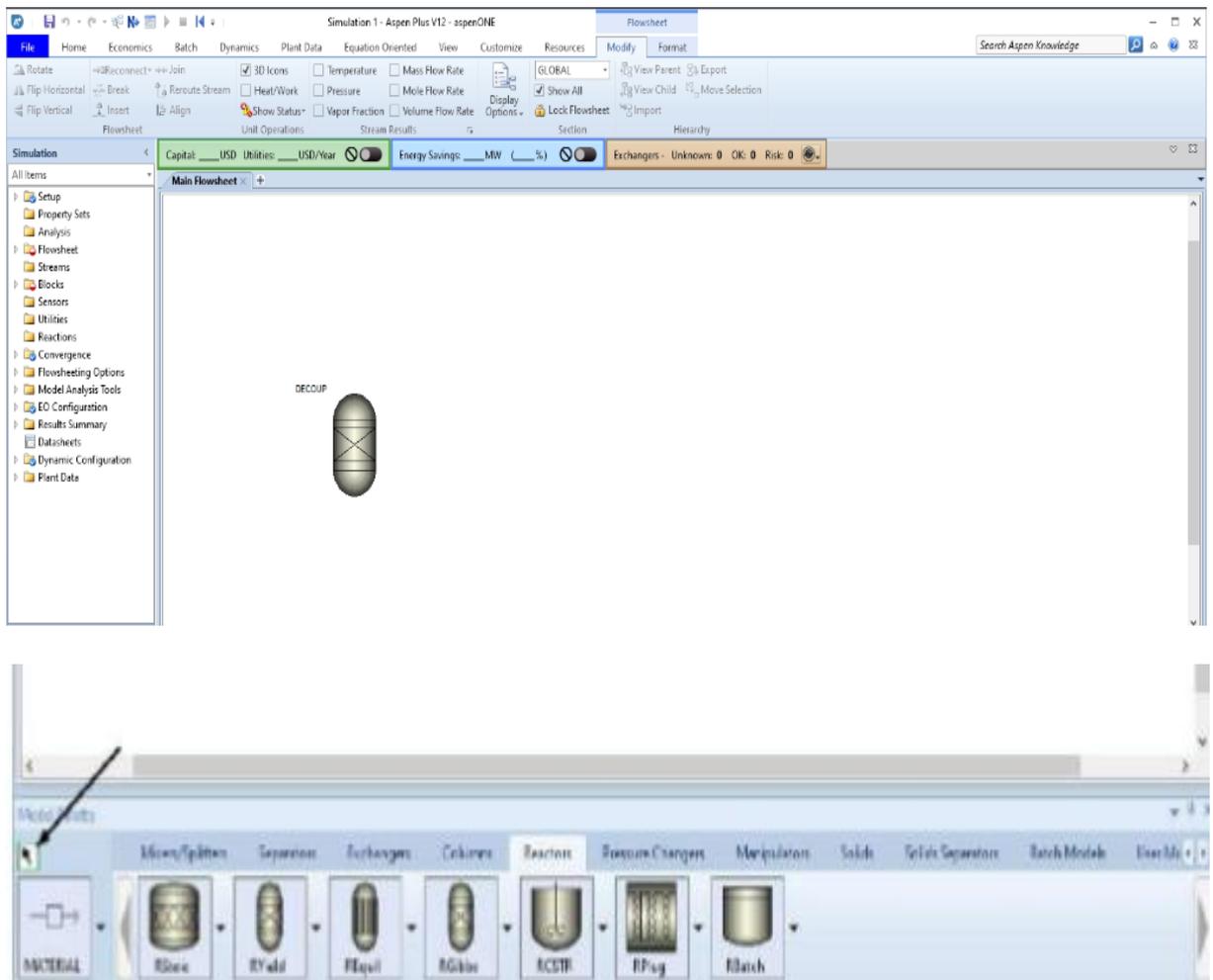


Figure (IV.11) : Placer RYield sur le schéma.

(La figure IV.12) montre les spécifications de «RYied», et Valid phases est réglé sur vapor– Only. La sélection a été faite pour avoir une meilleure convergence de simulation.

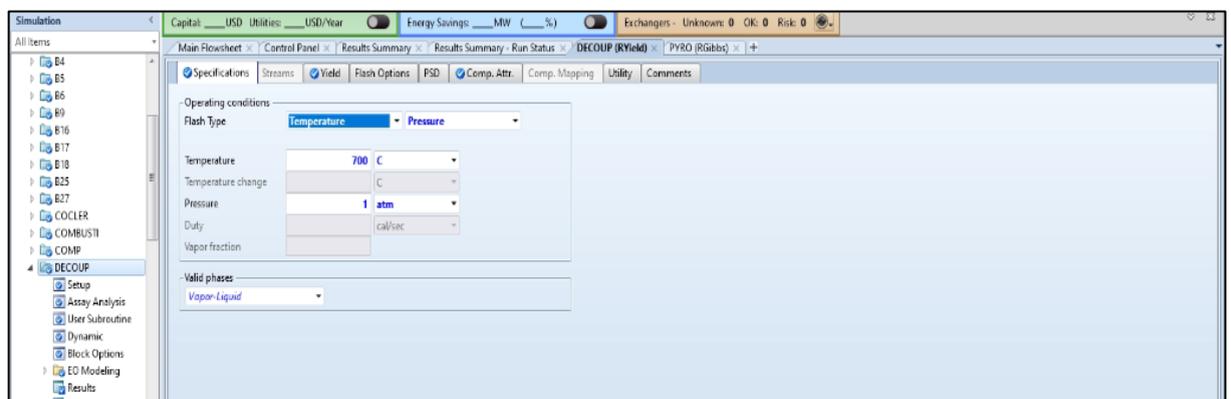


Figure (IV.12) : Spécifications du bloc « RYield » (P, T).

- Cliquer sur yield pour ajouter les débits.

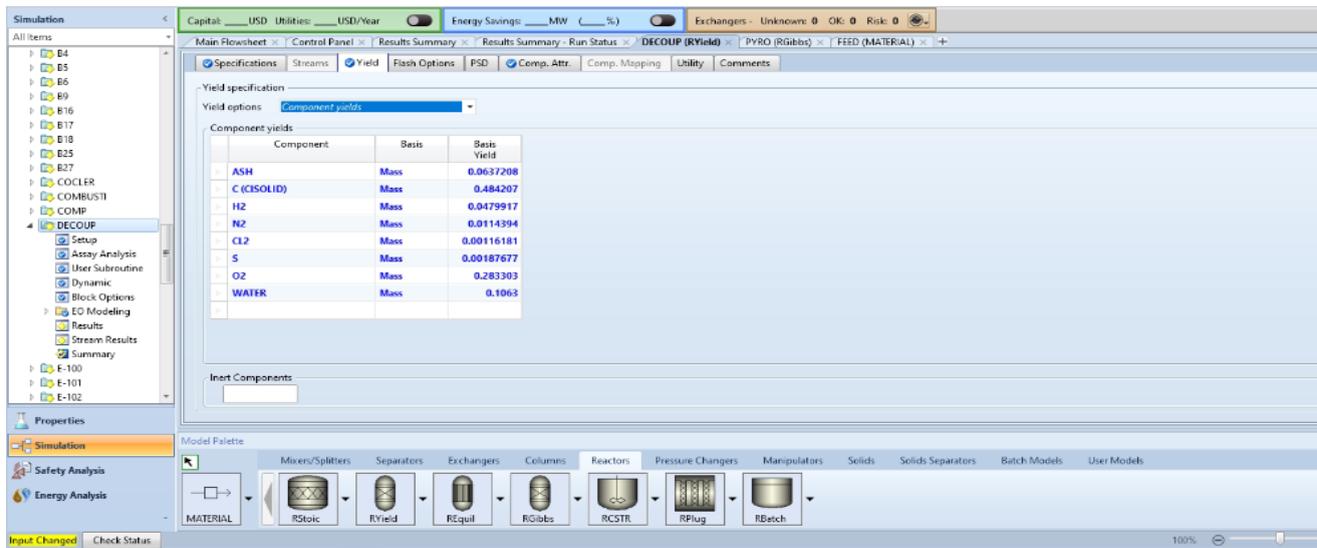


Figure (IV.13) : Spécifications d'RYield en débit de composition.

- Cliquer NC et sélectionner ASH dans compenent ID et selectioner Proxanal pour ajouter la masse fraction .

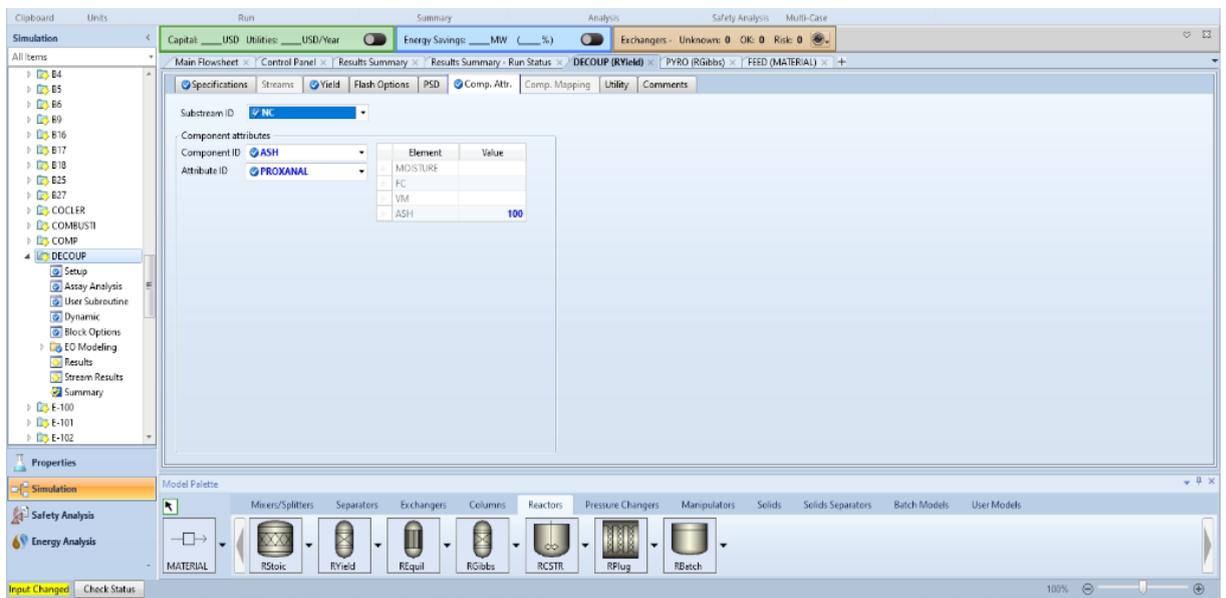


Figure (IV.14) : Spécifications d'RYield -ASH (PROXANAL en fraction massique).

- Après selectioner ultanal.

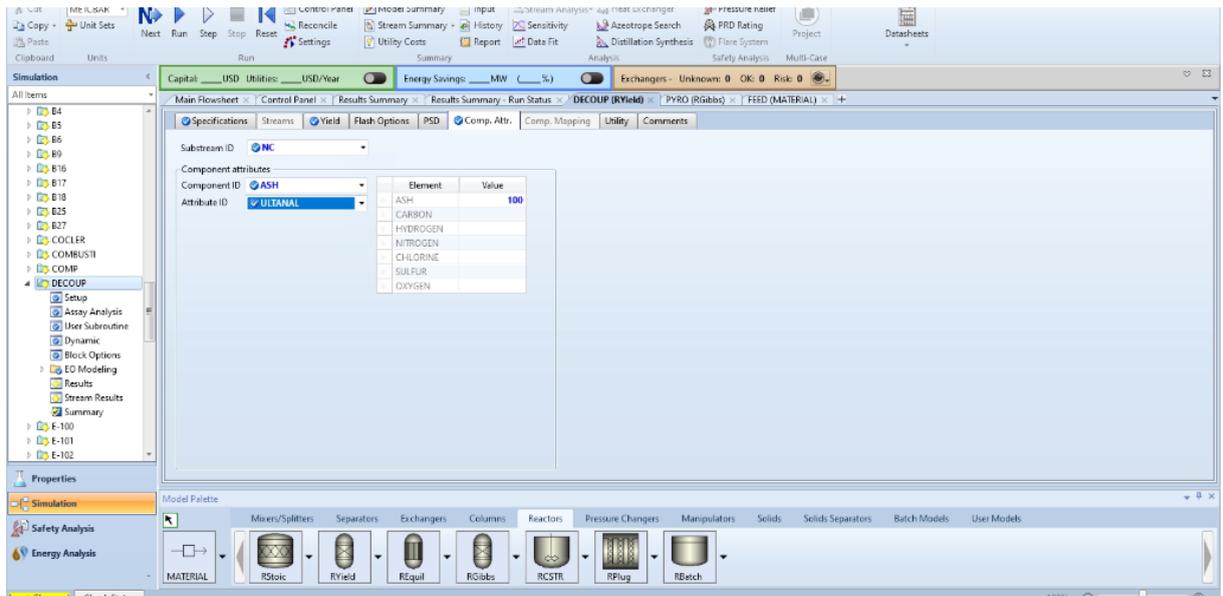


Figure (IV.15) : Spécifications d'RYield -ASH (ULTANAL en fraction massique).

- Après sélectionner sulfanal .

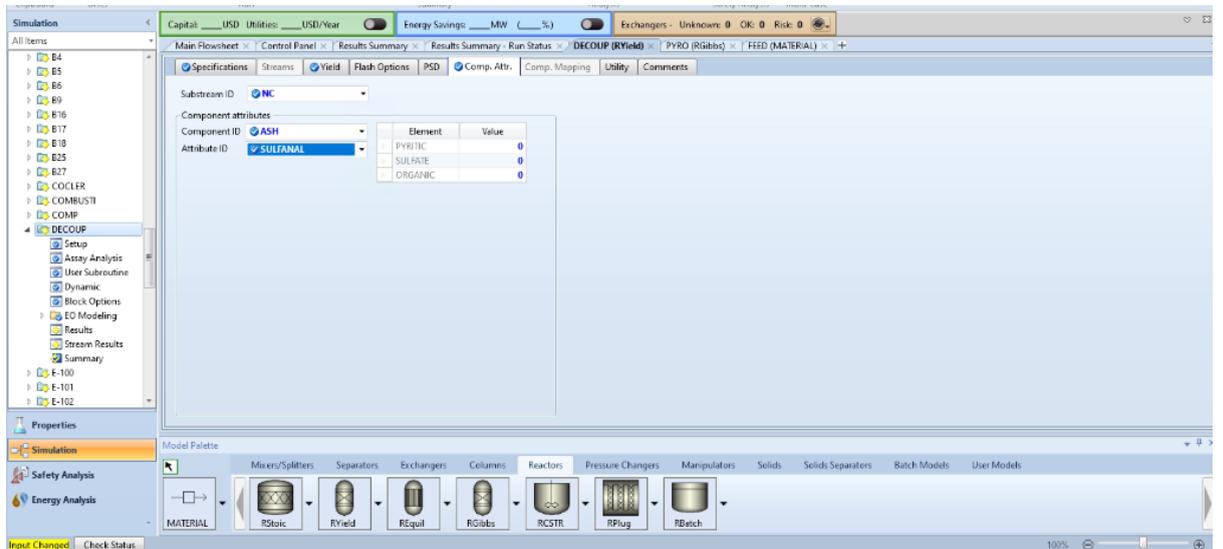


Figure (IV.16) : Spécifications d'RYield -ASH (SULFANAL en fraction massique).

- Répéter les mêmes étapes pour la biomasse et entrer les même valeurs (PROXANAL, ULTANAL, SULFANAL).

- Cette procédure est répétée pour l'ensemble des unités de procédé, en renseignant les spécifications à chacune d'elles:
- L'unité RGIBBS a simulé l'équilibre thermodynamique entre les gaz produits, notamment la formation de méthane (CH_4).

Tableau (IV. 1) : spécifications de RGIBBS.

Pression	1 atm
Température	800 C°

- L'unité SSPLIT est utilisée pour distribuer un composé ou un mélange entre deux flux sans qu'aucune réaction chimique ni changement d'état physique n'ait lieu.

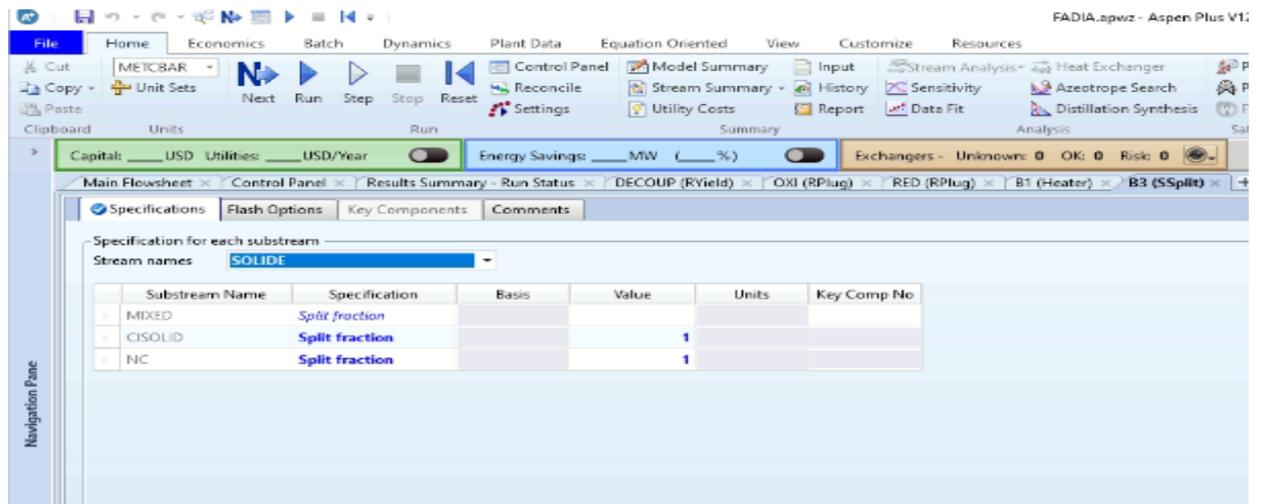


Figure (IV.17) : spécification ssplit (solide).

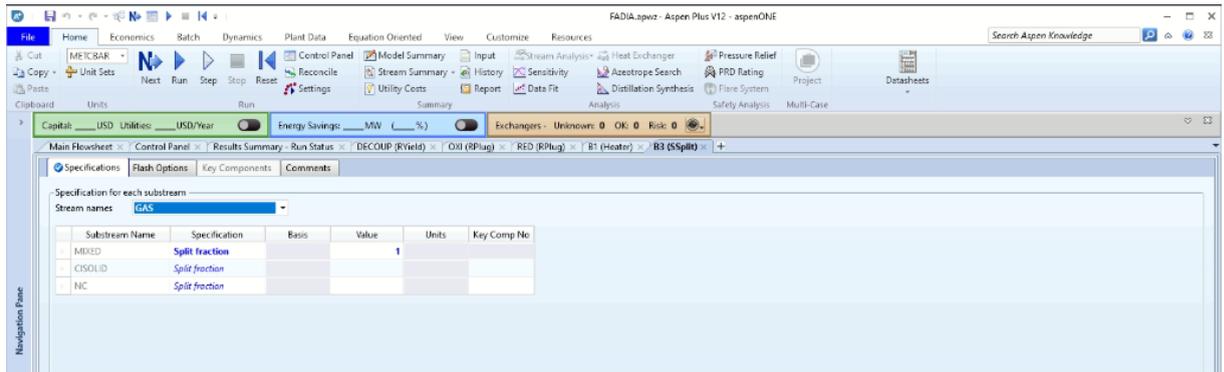


Figure (IV.18) : spécification split (gaz)

- L'unité MIXER permet de combiner plusieurs courants d'alimentation en un seul flux homogène, sans réaction chimique ni changement d'état physique.
- L'unité RPlug est utilisée pour modéliser un réacteur à piston, où les réactions chimiques se produisent le long du réacteur selon un écoulement unidirectionnel sans mélange axial.

Tableau (IV. 2) : spécification de RPlug 1.

Température	900C°
Length	100 mètre
Diamètre	15 mètre

- Spécification des réactions :
- Cliquez sur {Réactions} dans la colonne à gauche de la fenêtre du {Data Browser}, puis cliquez à nouveau sur {Réactions}, (figure IV.22). Pour configurer une nouvelle réaction, cliquez sur {New}.

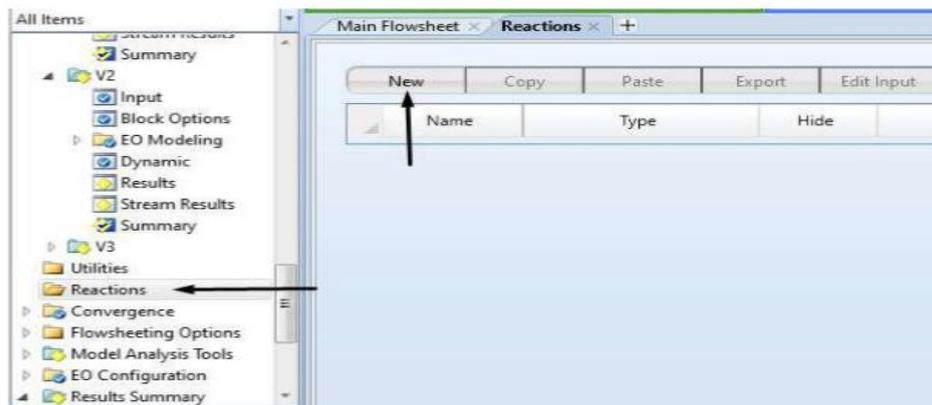


Figure (IV.19) : Configuration des réactions.

La petite fenêtre illustrée à (la figure IV.20) s'ouvre sur laquelle un nom de réaction R- 1 est spécifié et le type de réaction est sélectionné. Donc Powerlaw est sélectionné



Figure (IV.20) : Taux de réaction selon la loi de puissance.

- Changer le non R-1 d'OXI.
- La fenêtre illustrée à la figure (IV.23) s'ouvre. Dans la case de Réaction type, sélectionnez EQUILIBUIM. Notez qu'il s'agit de la Réaction N°1, comme indiqué dans la case Réaction N_0

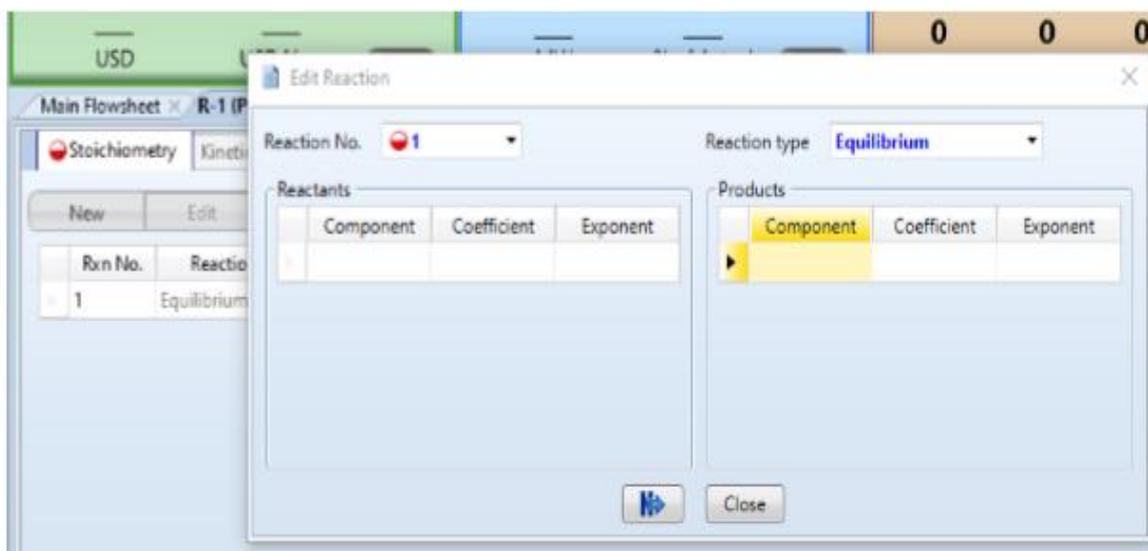


Figure (IV.21) : Spécification du type de réaction.

- Cliquez sur la case Réactant Components et utilisez le menu déroulant pour sélectionner le composant ‘ Monoxyde de carbone’. Réglez le coefficient stœchiométrique sur « -1 » (le réactif est consommé) et la Réglez case "Exposent" «1»; (voir Fig.IV.22). Répétez l'opération pour l'autre réactif "Oxygéné". Réglez le coefficient sur « -0.5 » et la Réglez case "Exposent" « 0.25»; De la même manière, définissez-le produit comme «Dioxyde de carbone» avec un coefficient de « 1 » (produit dans la réaction). Réglez case "Exposent" « 0.5 » ; Cliquez sur « Next »

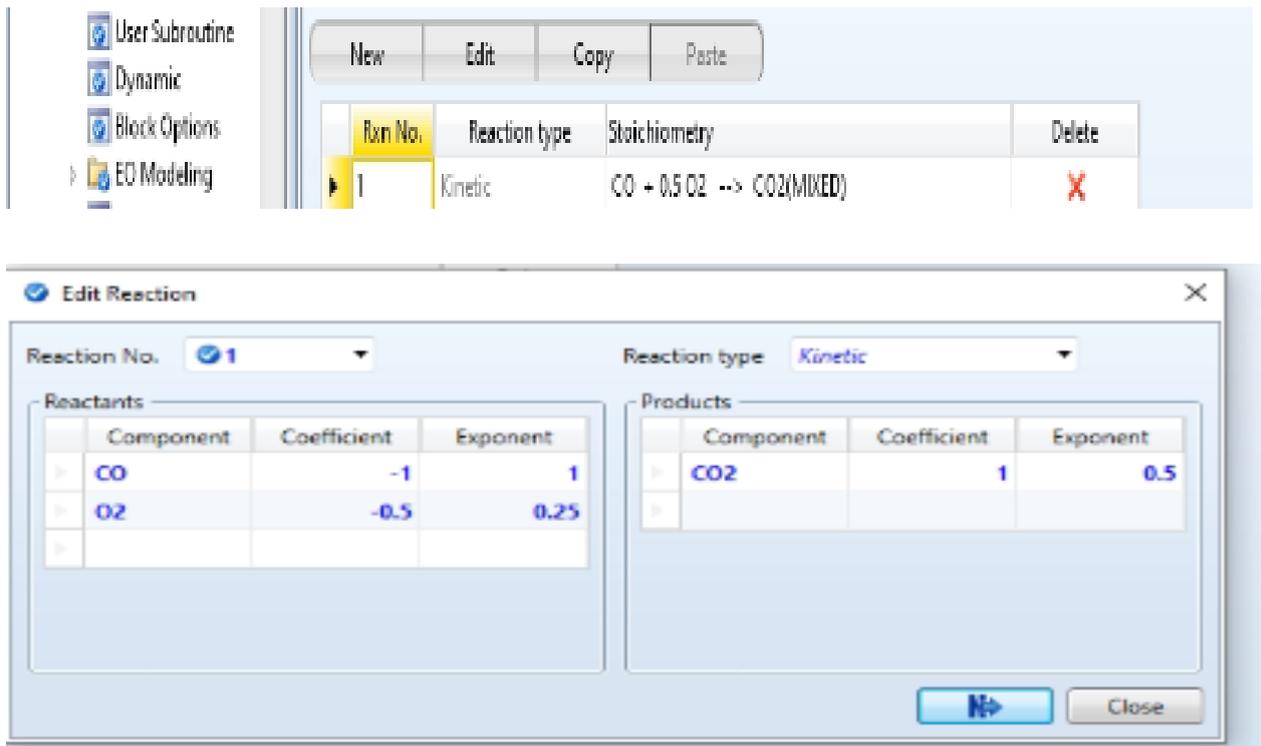


Figure (IV.22) : Spécification des réactifs et des produits pour la réaction N°1 (OXI).

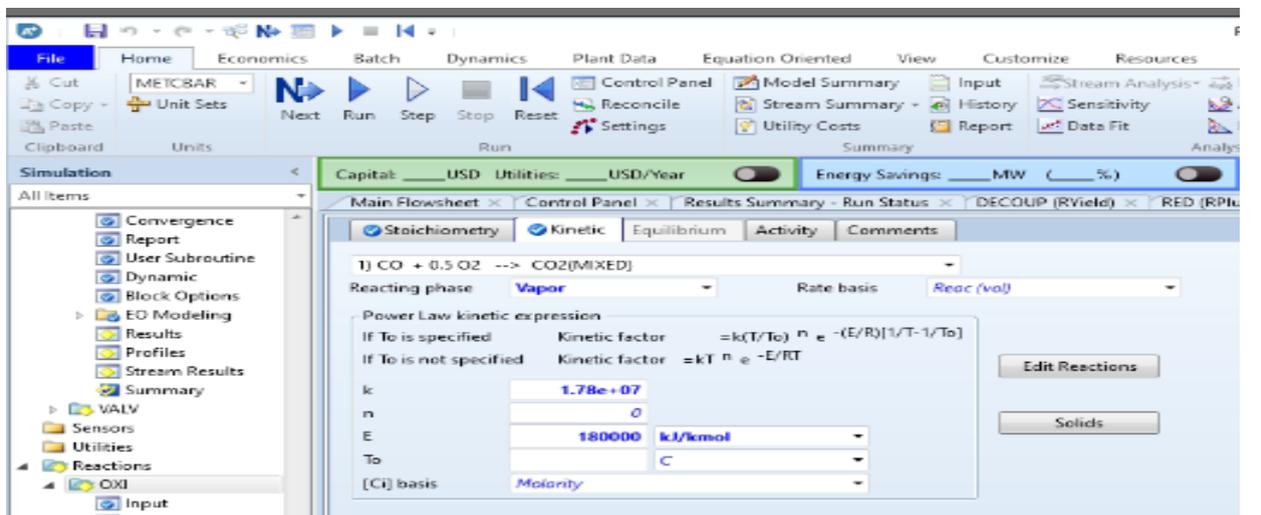


Figure (IV.23) : Spécification des paramètres cinétiques de la réaction N°1 (OXI).

➤ Répéter les mêmes étapes pour la deuxième réaction, Réaction N°2

- stœchiométrie sur « -1 » (le réactif est consommé) et la Réglez case "Exponent" «0.8»; (voir Fig.IV.24). Répétez l'opération pour l'autre réactif "Oxygène". Réglez le coefficient stœchiométrique sur « -0.5 » et laissez la case "Exponent" vide ; De la même manière, définissez-le produit comme « Monoxyde de carbone Cliquez sur la case Réactant Components et utilisez le menu déroulant pour sélectionner le composant ' Méthane''. Réglez le coefficient» avec un coefficient de « 1 » (produit dans la réaction). Réglez case " laissez la case "Exponent" vide Répétez l'opération pour l'autre produit «hydrogène» avec un coefficient de « 2» (produit dans la réaction). Réglez case " laissez la case "Exponent" vide; Cliquez sur « Next ».

The screenshot displays the Aspen Plus V12 interface. The 'Stoichiometry' tab is active, showing a table of reactions. Reaction 2 is selected, and the 'Edit Reaction' dialog box is open. The dialog shows the following configuration:

Reactants			Products		
Component	Coefficient	Exponent	Component	Coefficient	Exponent
METHANE	-1	0.8	CO	1	
O2	-0.5		H2	2	

Figure (IV.24) : Spécification des réactifs et des produits pour la réaction N°2 (OXI).

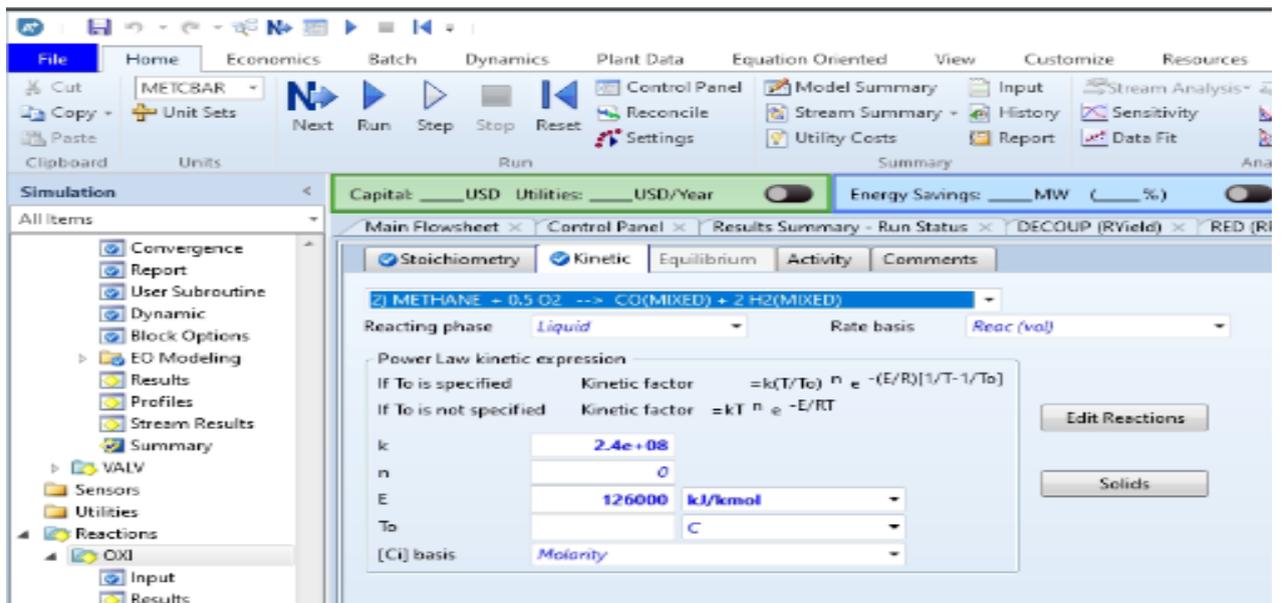


Figure (IV.25) : Spécification des paramètres cinétiques de la réaction N°2 (OXI).

- Répéter toutes les étapes pour RED.
- Réaction N°1 :

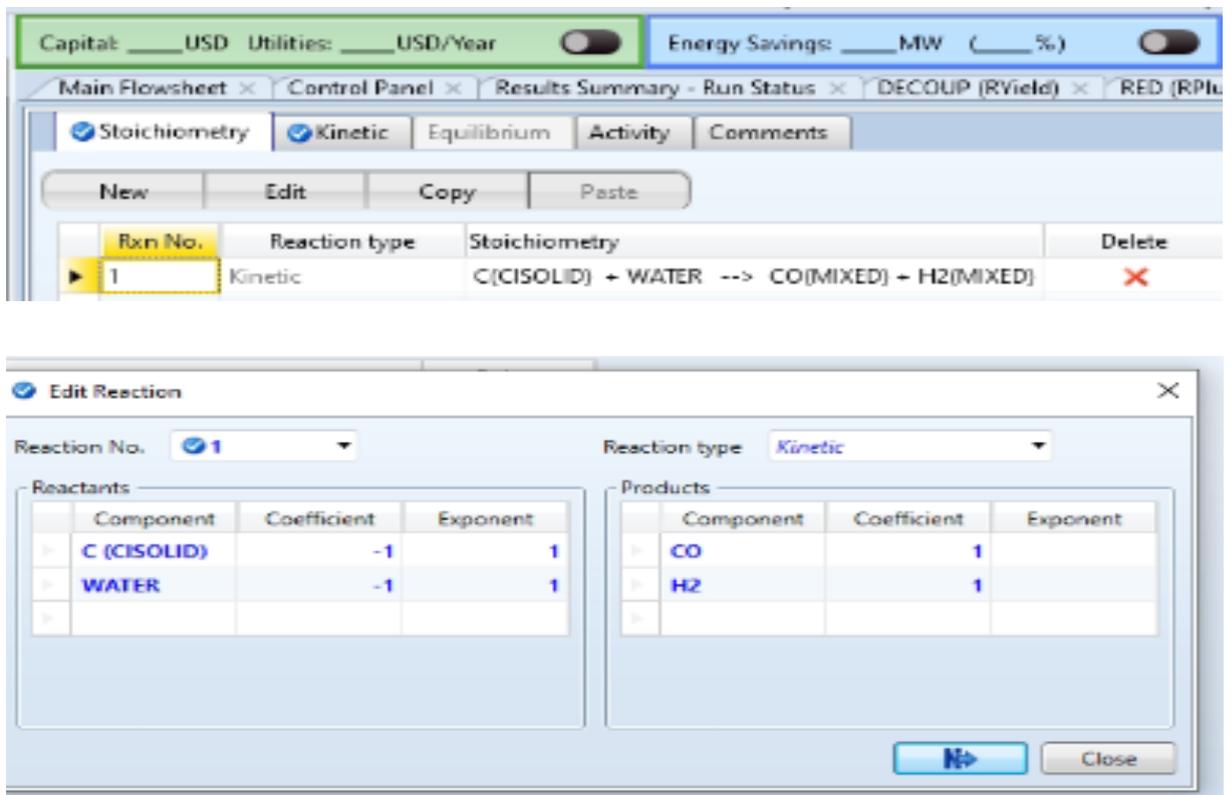


Figure (IV.26) : Spécification des réactifs et des produits pour la réaction N°1.

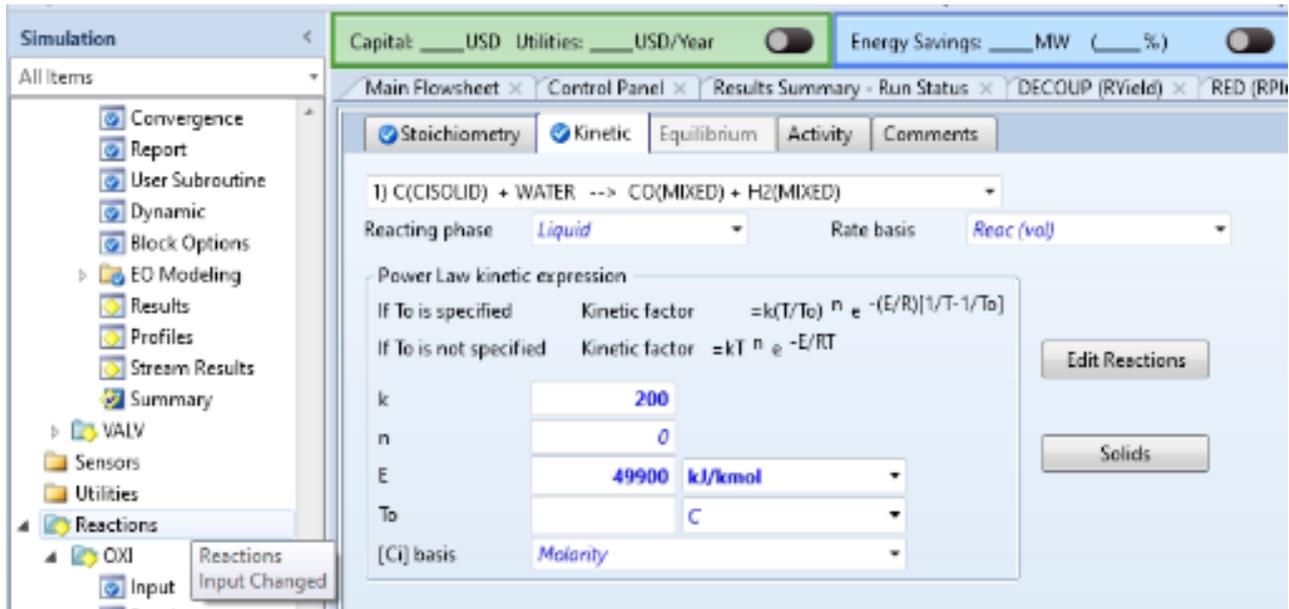


Figure (IV.27) : Spécification des paramètres cinétiques de la réaction N°1.

- Réaction N°2 :

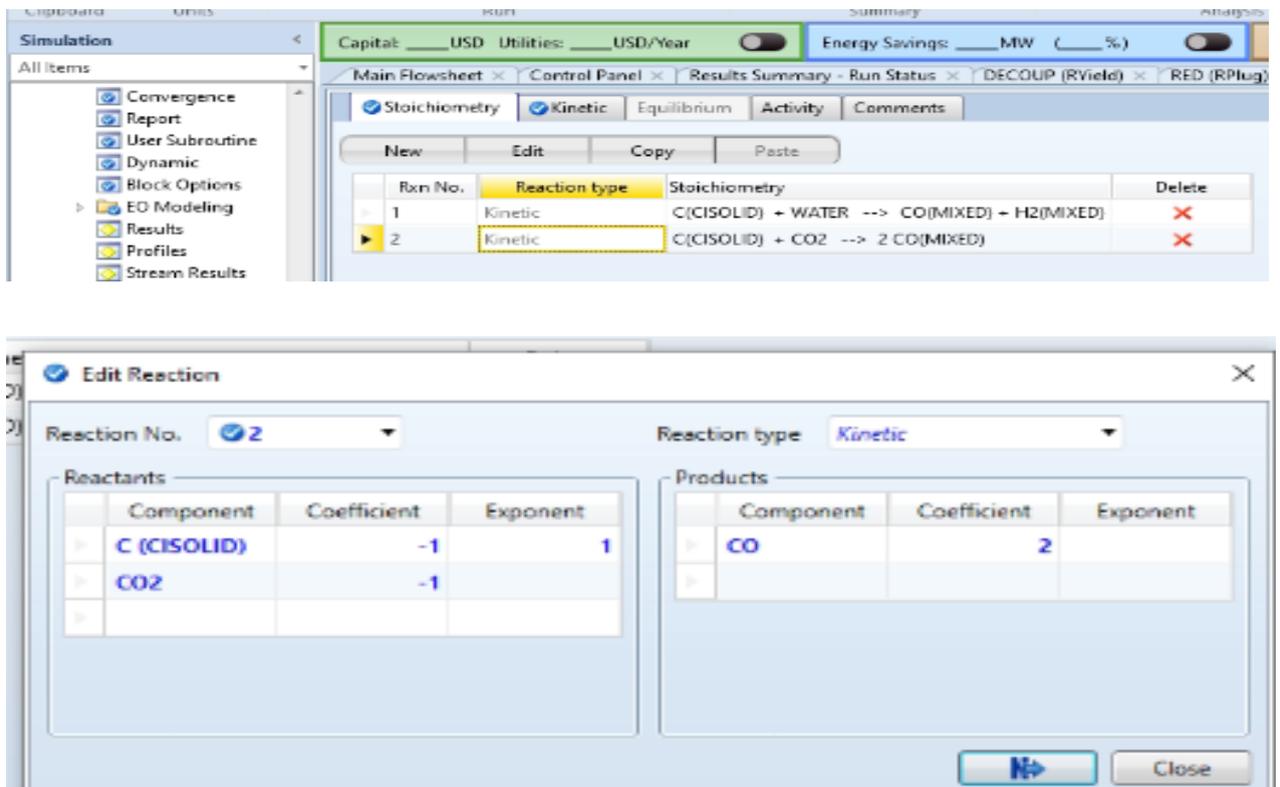


Figure (IV.28) : Spécification des réactifs et des produits pour la réaction N°2.

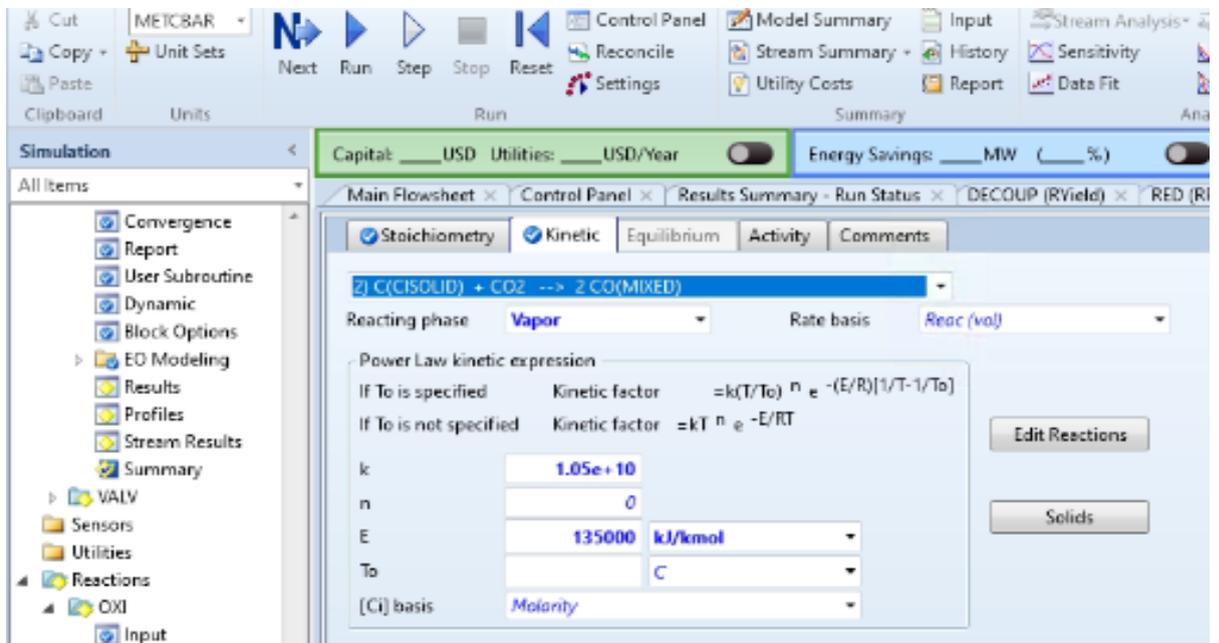


Figure (IV.119) : Spécification des paramètres cinétiques de la réaction N°2.

- Réaction N°3:

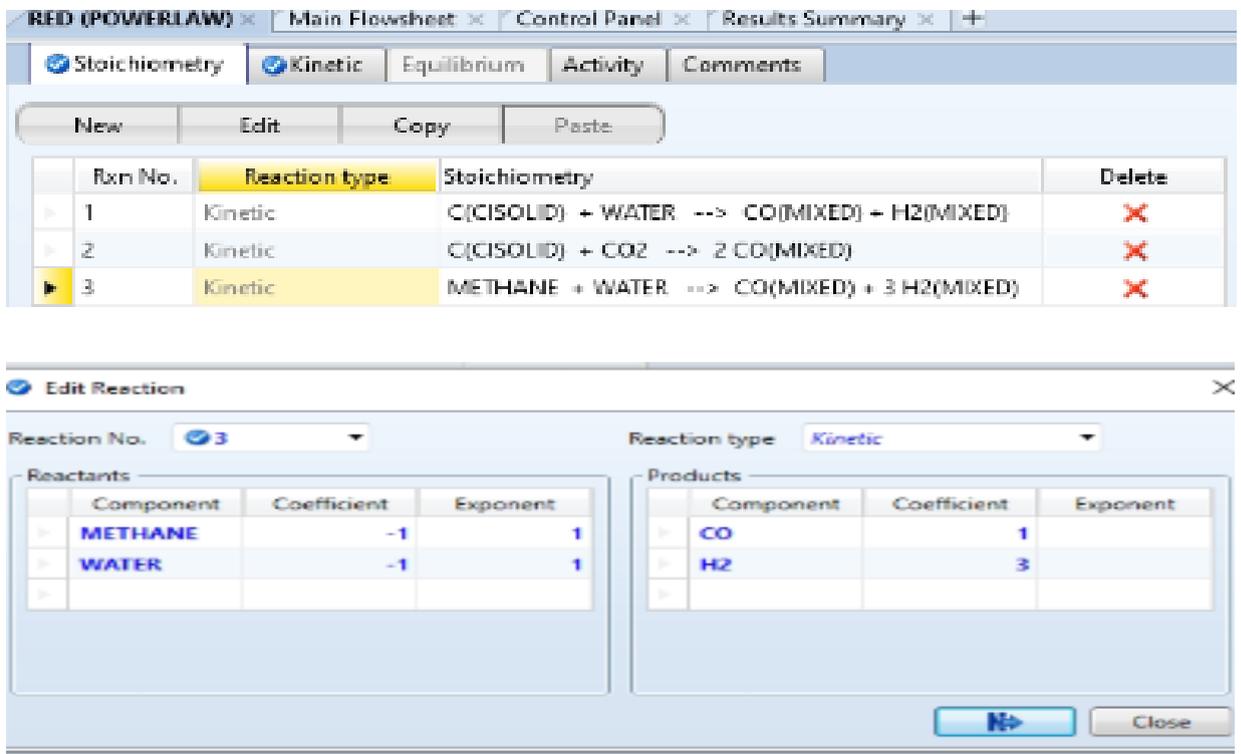


Figure (IV.30) : Spécification des réactifs et des produits pour la réaction N°3.

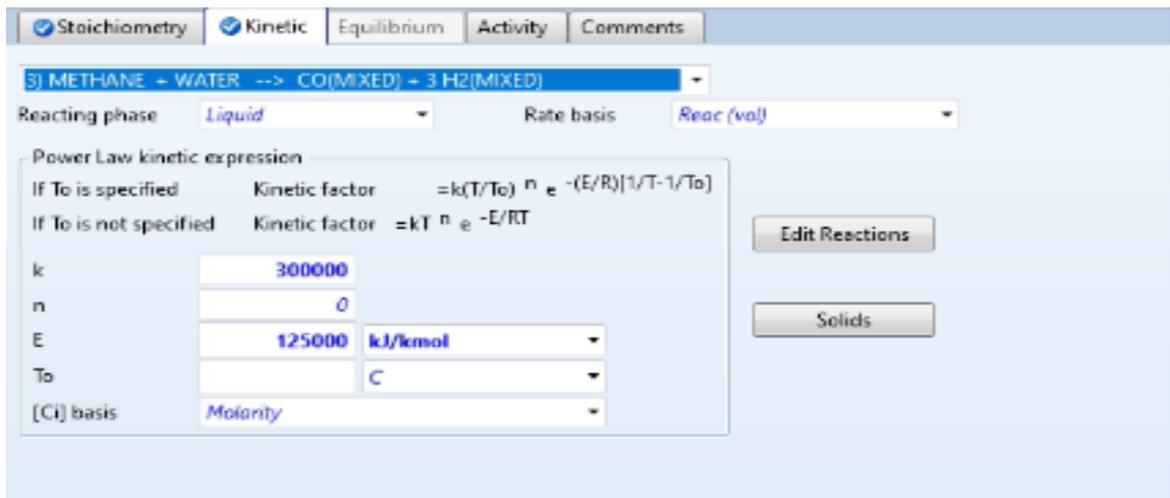


Figure (IV.31) : Spécification des paramètres cinétiques de la réaction N°3.

- Réaction N°4 :

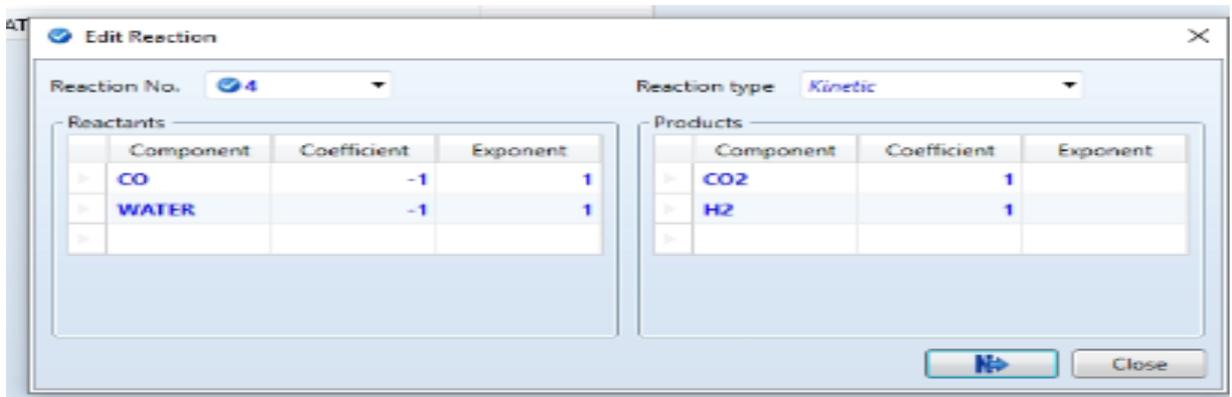
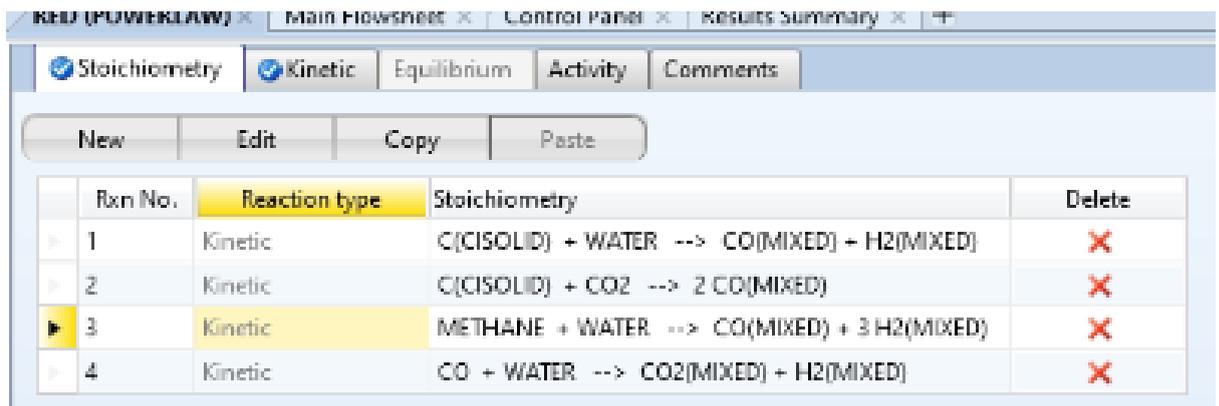


Figure (IV.32) : Spécification des réactifs et des produits pour la réaction N°4.

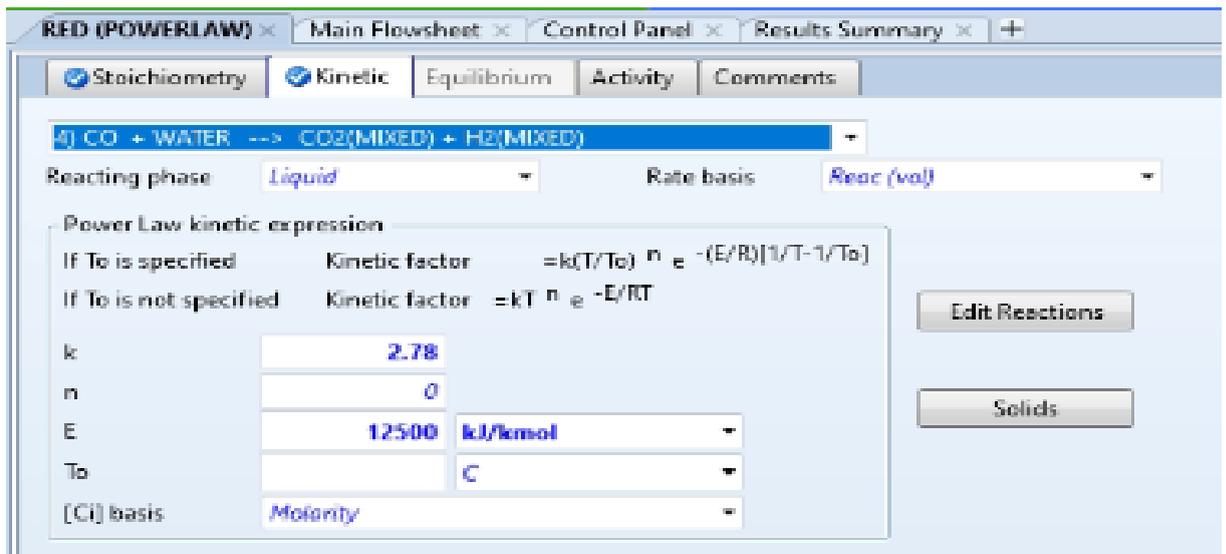


Figure (IV.33) : Spécification des paramètres cinétiques de la réaction N°4.

- Ajouter autre unité RPlug.

Tableau (IV. 3) : spécification de RPlug 2.

Température	900c°
Réacteurs type	Réacteurs specified température
Length	100 mètre
Diamètre	15 mètre

- Ajouter L’unité HEATER est utilisée pour modéliser un échangeur de chaleur simple, permettant d’augmenter ou de diminuer la température d’un courant sans provoquer de réaction chimique ni de changement de composition.

Tableau (IV. 4): spécification de heater.

Température	25 C°
Pressure	81 ,3 K Pa

- Ajouter L’unité SEP est utilisée pour séparer un courant d’alimentation en plusieurs flux de sortie selon la composition, sans réaction chimique ni échange thermique.

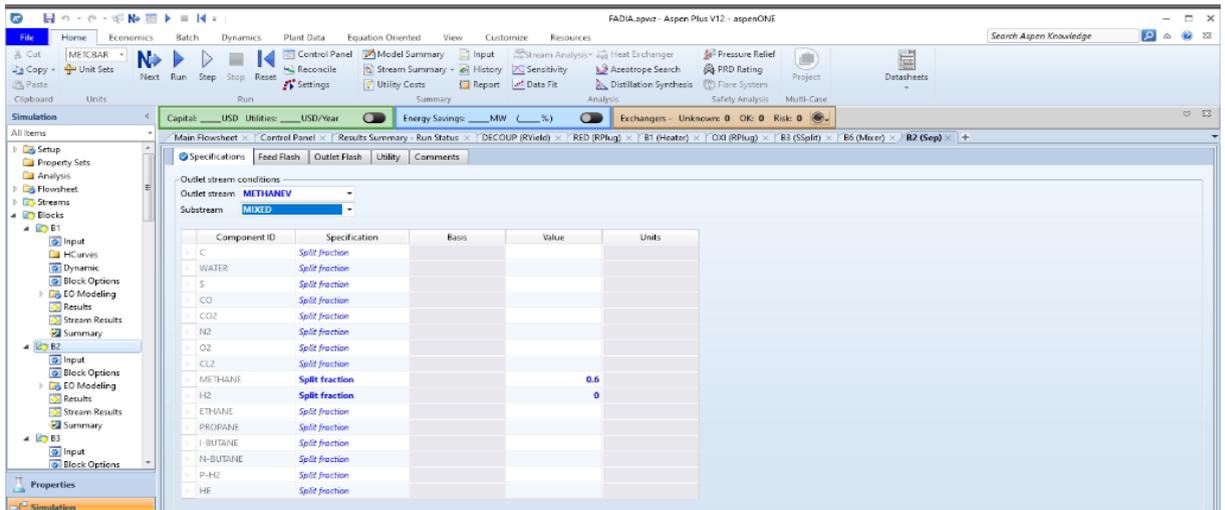


Figure (IV.34): spécification de SEP (METHANE(Vapeur)).

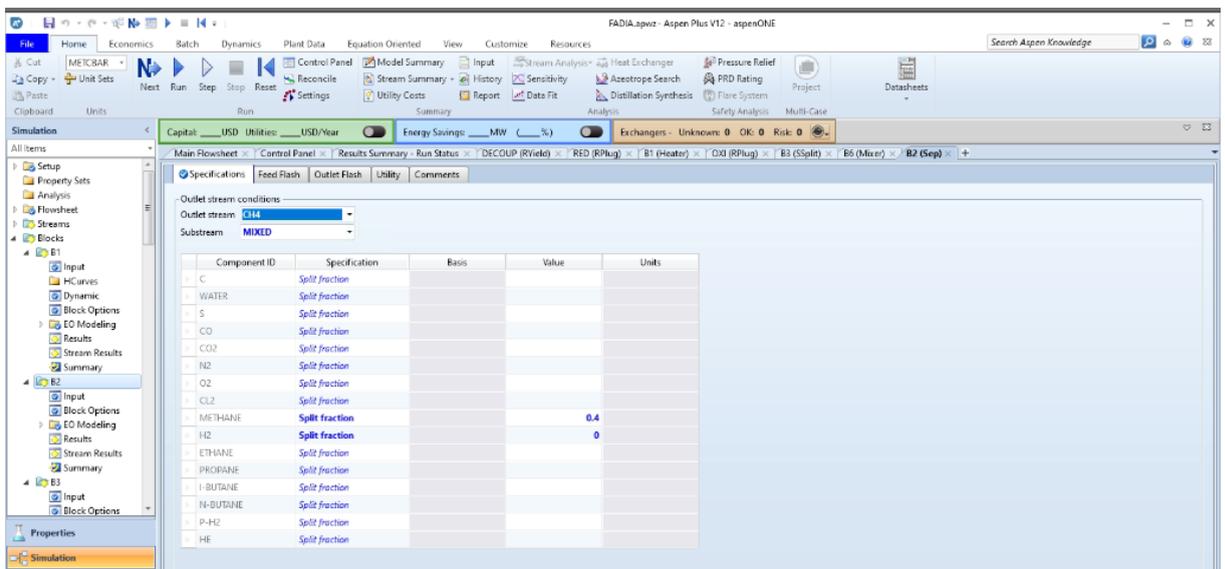


Figure (IV.35) : spécification SEP (CH4 liquide).

Pour installer des flux pour le matériau, les produits et les connexions intermédiaires, cliquez sur la flèche de la zone ‘Matériel Stream ‘en bas à gauche de la fenêtre et sélectionnez ‘Matériel’. Déplacer le curseur sur le schéma produit un certain nombre de flèches sur l’entrée et la sortie de bloc. Un flux est installé en cliquant d’abord sur le schéma, puis en cliquant sur la flèche pointant vers le réacteur. Montre le schéma final avec toutes les lignes installées et les flux renommés. Ensuite, enregistrez le fichier dans un répertoire approprié (La figure IV.36).

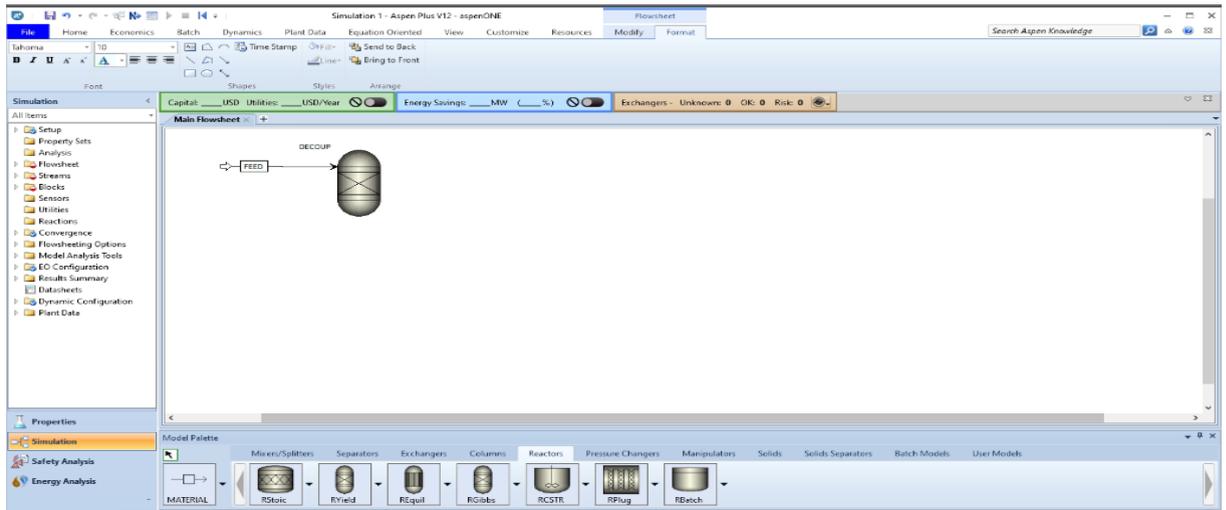


Figure (IV.36) : la connexion de feed et bloc RYield.

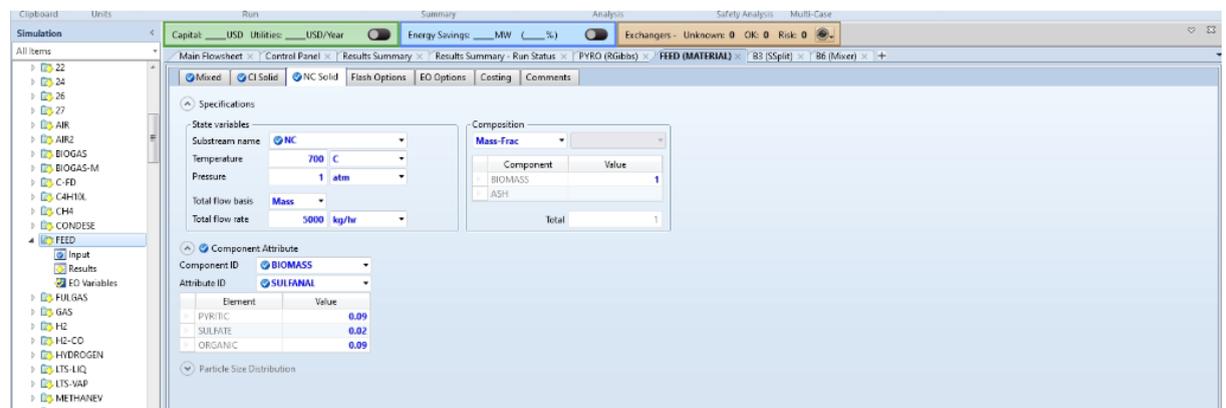


Figure (IV.37) : Propriétés d'FEED (biomass) T, P et de débit de composition et la mass fraction (SULFANAL).

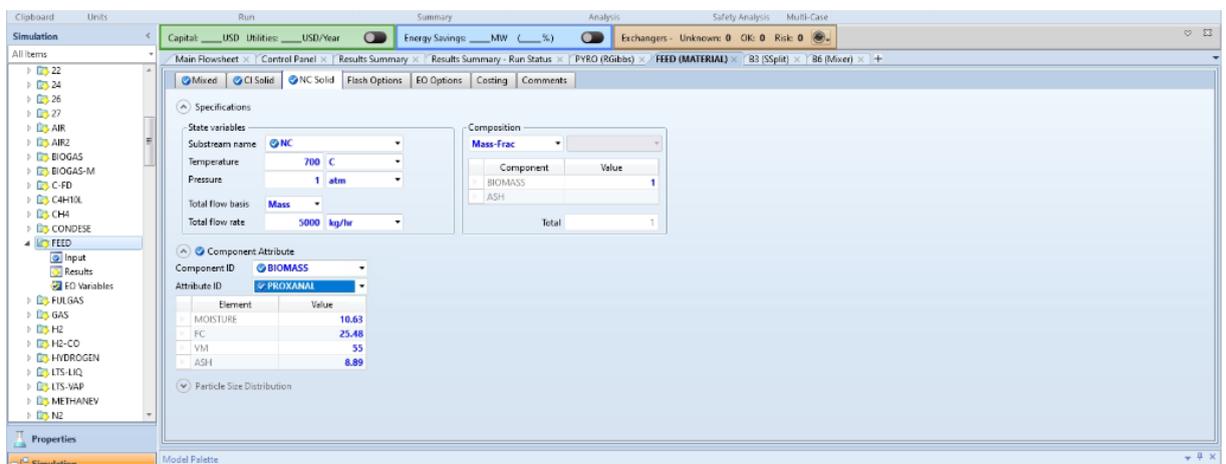


Figure (IV.38) : Propriétés de T, P et de débit de composition et la mass fraction de biomasse (Proximal)

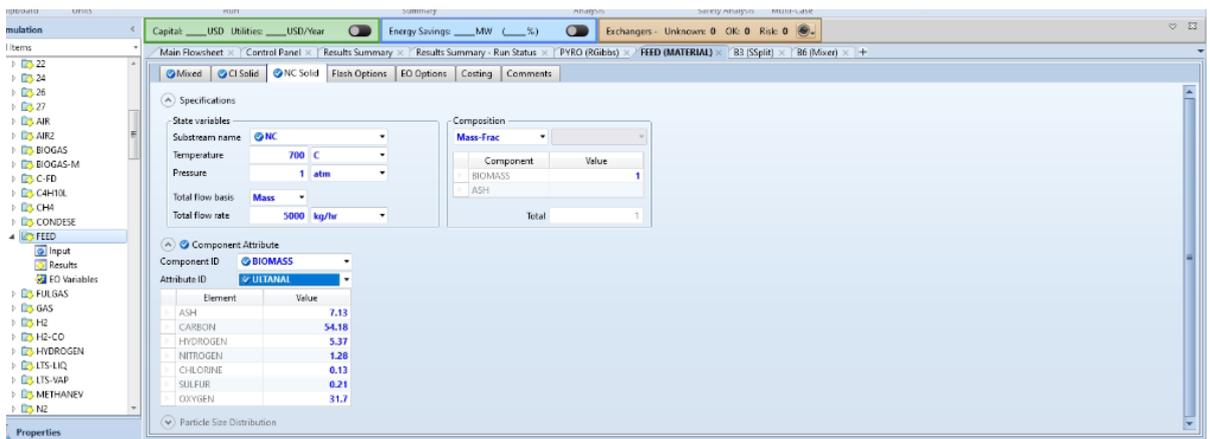


Figure (IV.39) : Propriétés de T, P et de débit de composition et la mass fraction de biomasse (ULTANAL).

- L'interconnexion entre toutes les unités de procédé.

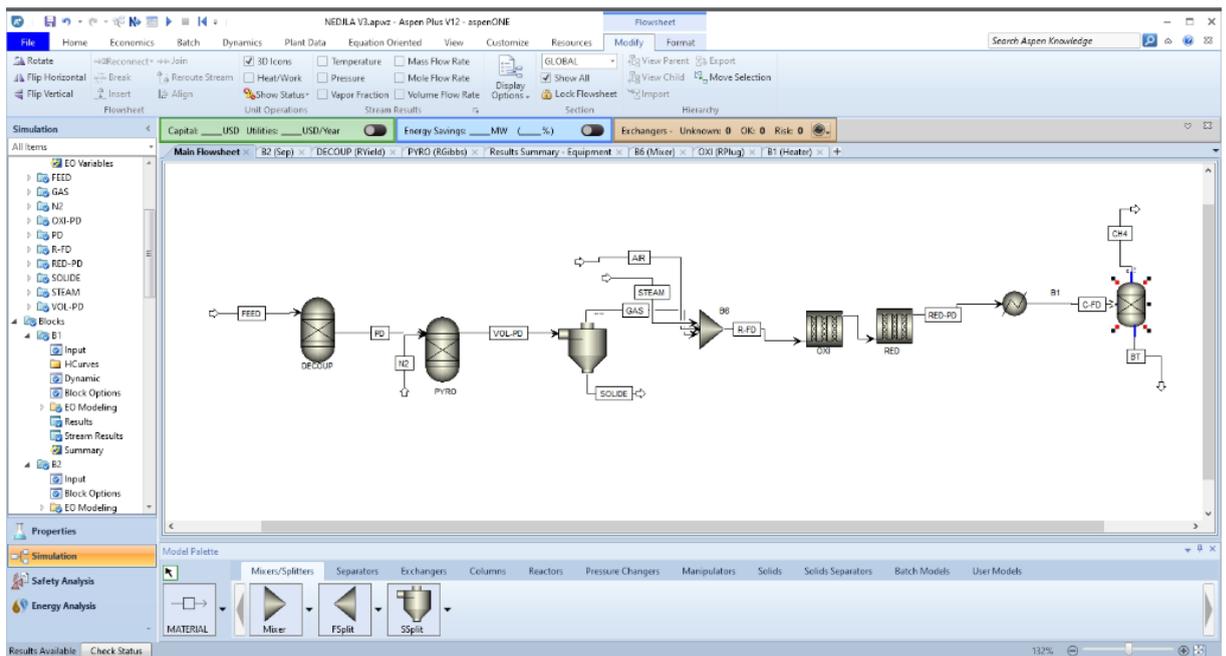


Figure (IV.40) : Diagramme final de l'étape 1.

Ce méthane est ensuite séparé et orienté vers les étapes suivantes : une partie est utilisée pour produire de l'hydrogène, et l'autre est destinée à la liquéfaction.

IV.1.2.1.2. Etape 2 : production de l'hydrogène à partir le méthane reformage à la vapeur (SMR) :

Dans cette deuxième étape, le méthane issu de la digestion anaérobie est utilisé comme matière première dans une réaction de reformage à la vapeur d'eau (Steam Méthane Reforming – SMR) avec des autres composantes H_2 , H_2O , CO afin de produire de l'hydrogène. Ce procédé thermo-chimique est largement utilisé à l'échelle industrielle et se déroule à haute température (environ 800 °C) en présence de vapeur d'eau.

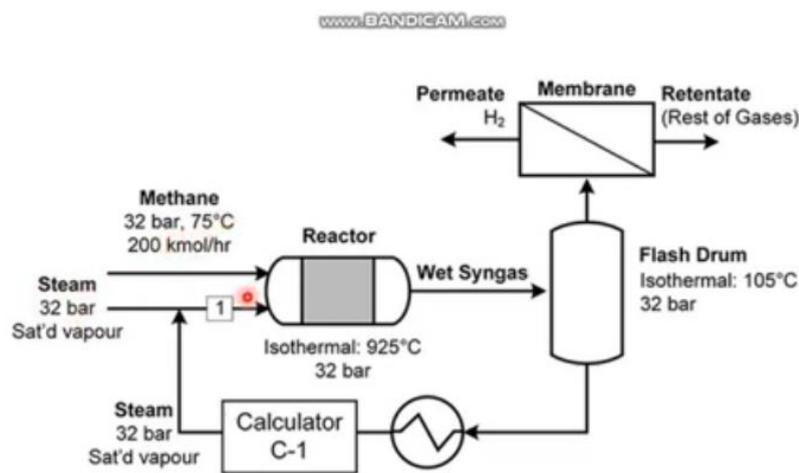
La réaction principale est endothermique :



Suivie généralement par une réaction secondaire de décalage eau-gaz (Water-Gas Shift) pour maximiser la production d'hydrogène :



La modélisation dans Aspen Plus utilise les unités suivantes :



Methane reforming with water recovery and recycle.

Figure (IV.41) : procédés de vapo reformage de méthane.

- REquil

Fonction : Modélise la réaction de reformage du méthane à l'équilibre thermodynamique.

→ Produit un mélange contenant principalement H₂, CO, CO₂ et un excès de vapeur d'eau.

La réaction :



Tableau (IV. 5) : spécification de REQuil

Température	925C°
Pressure	32 bar

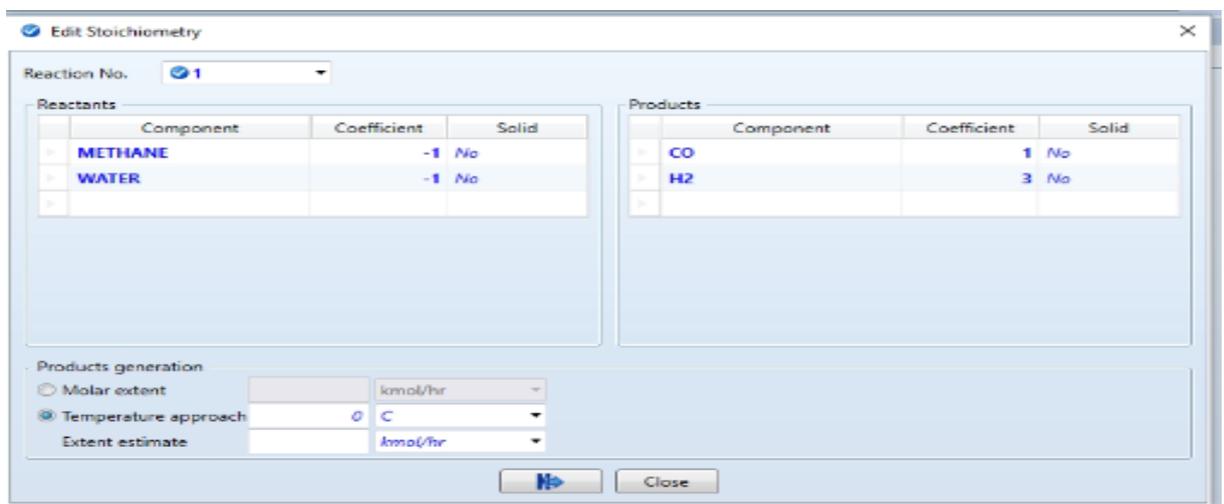


Figure (IV.42) : Spécification des réactifs et des produits pour la réaction.

- FLASH2

Fonction : Effectue une séparation biophysique gaz-liquide selon la pression / température.

→ Sépare les composés volatils (H₂, CO, CO₂) de l'eau éventuellement condensé

Tableau (IV. 6) : spécification de flash 2.

Température	105 C°
Pressure	32 bar

SEP Fonction : Isole l'hydrogène pur des autres gaz produits (CO, CO₂, vapeur résiduelle).

→ Permet d'obtenir un flux de H₂ enrichi destiné à la récupération.

Component ID	Specification	Basis	Value	Units
CH4	Split fraction		0	
H2O	Split fraction		0	
CO	Split fraction		0	
H2	Split fraction		1	

Figure (IV.43) : spécification de sep (PER).

- HEATER

Fonction : Chauffe le mélange de méthane et de vapeur d'eau à haute température (700–900 °C) avant la réaction.

→ Prépare les conditions thermiques optimales pour initier la réaction de reformage.

Tableau (IV. 7) : spécification de HEATER.

Pressure	1 bar
Vapor fraction	0

- L'interconnexion entre toutes les unités de procédé.

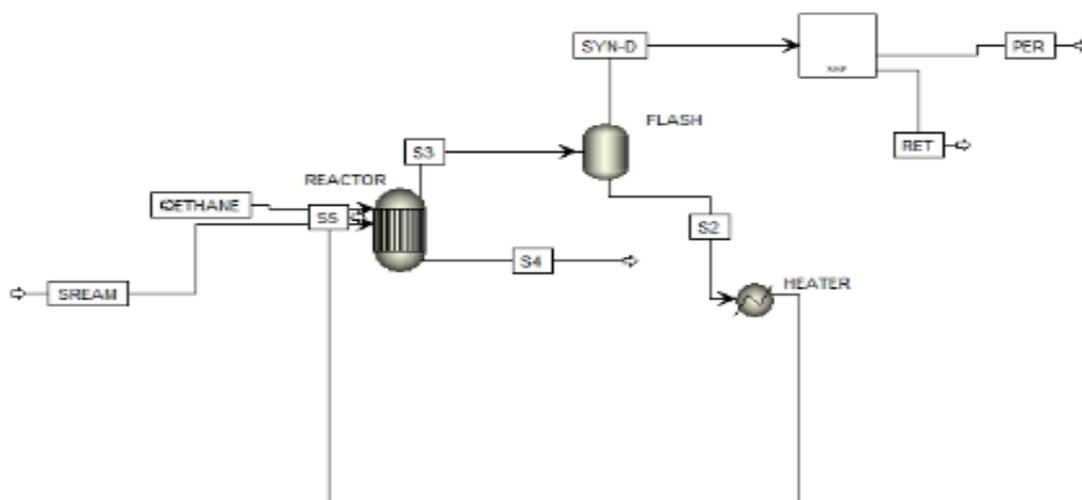


Figure (IV.44) : Diagramme final de l'étape 2 (production de l'hydrogène à partir méthane).

Cette étape permet de produire un gaz enrichi en hydrogène, qui sera analysé en termes de pureté et de rendement dans la section des résultats.

IV.1.2.1.3. Etape 3 : liquéfaction de méthane:

À l'issue du reformage du méthane pour la production d'hydrogène, une partie du méthane non consommé peut être valorisée par liquéfaction, afin d'être stockée ou transportée sous forme liquide. Cette opération consiste à refroidir et à comprimer le méthane jusqu'à atteindre sa température de liquéfaction, située autour de $-161,5\text{ °C}$ à pression atmosphérique. On utilise CO_2 , H_2O , N_2 , méthane, éthane, propane, I-butane, N-butane comme des composants

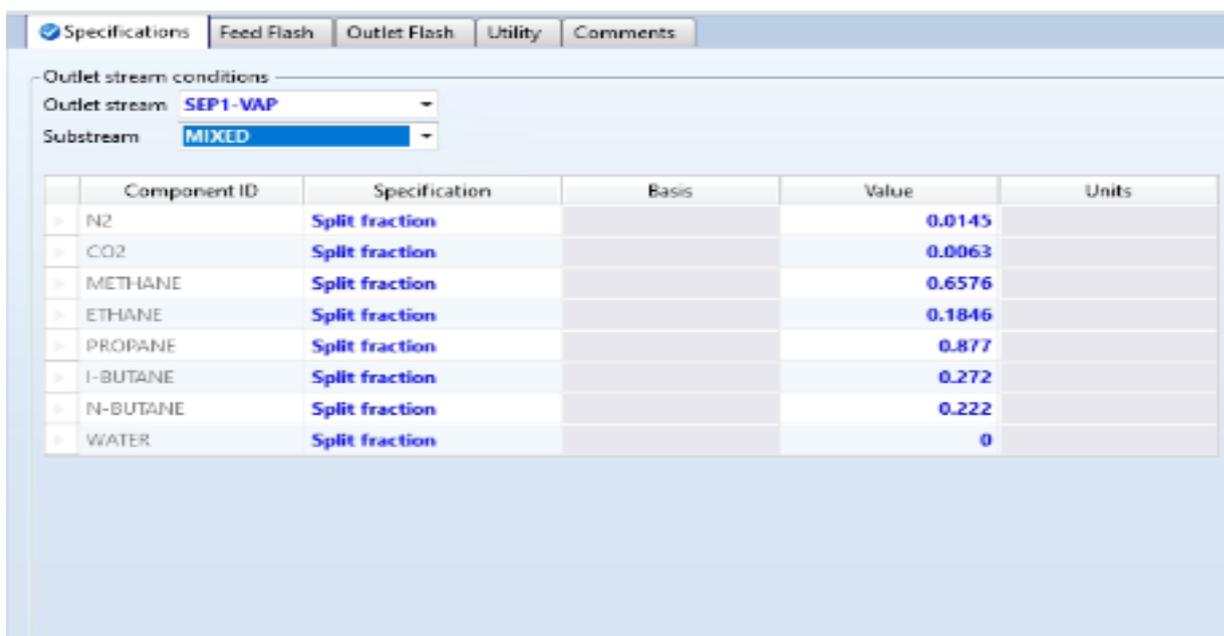
La liquéfaction du méthane est un procédé énergétiquement intensif, qui repose sur une série d'étapes de compression, de refroidissement progressif et de détente.

Ce procédé est inspiré des cycles thermodynamiques industriels comme le cycle Claude ou cycle de Joule-Thomson, utilisés dans la production de GNL (Gaz Naturel Liquéfié). La modélisation permet d'évaluer les conditions thermodynamiques

optimales pour obtenir un taux élevé de liquéfaction, tout en minimisant la consommation énergétique.

Dans Aspen Plus, cette opération est modélisée à l'aide des unités suivantes :

- SEP-1 : Sépare les impuretés initiales du flux de méthane au début du procédé



Component ID	Specification	Basis	Value	Units
N2	Split fraction		0.0145	
CO2	Split fraction		0.0063	
METHANE	Split fraction		0.6576	
ETHANE	Split fraction		0.1846	
PROPANE	Split fraction		0.877	
I-BUTANE	Split fraction		0.272	
N-BUTANE	Split fraction		0.222	
WATER	Split fraction		0	

Figure (IV.45): spécification de sep.

- HEATER-1 : Refroidit le méthane pour entamer la descente en température.

Tableau (IV. 8) : spécification de HEATER 1

Température	14.85 C°
Pressure	0.68901 bar

- HEATER-2 : Continue le refroidissement du méthane jusqu'à des conditions proches de la liquéfaction

Tableau (IV. 9): spécification de HEATER 2.

Température	-18.15
Pressure	0.68901 bar

SEP-2 : Sépare certains composants du flux refroidi avant son homogénéisation.

Component ID	Specification	Basis	Value	Units
N2	Split fraction		0.0179	
CO2	Split fraction		0.0066	
METHANE	Split fraction		0.7664	
ETHANE	Split fraction		0.1565	
PROPANE	Split fraction		0.0414	
I-BUTANE	Split fraction		0.007	
N-BUTANE	Split fraction		0.0043	
WATER	Split fraction			

Figure (IV.46): spécification de sep.

- MIXER : Combine les différents flux pour former un courant homogène avant la séparation finale.
- FLASH2 : Effectue la séparation finale en deux phases (liquide et vapeur), permettant d’obtenir le méthane liquéfié pur.

Component ID	1st Spec	2nd Spec
N2	Split fraction	Mole frac
CO2	Split fraction	Mole frac
METHANE	Split fraction	Mole frac
ETHANE	Split fraction	Mole frac
PROPANE	Split fraction	Mole frac
I-BUTANE	Split fraction	Mole frac
N-BUTANE	Split fraction	Mole frac
WATER	Split fraction	Mole frac

Figure (IV.47) : spécification de flash2.

- L’interconnexion entre toutes les unités de procédé.

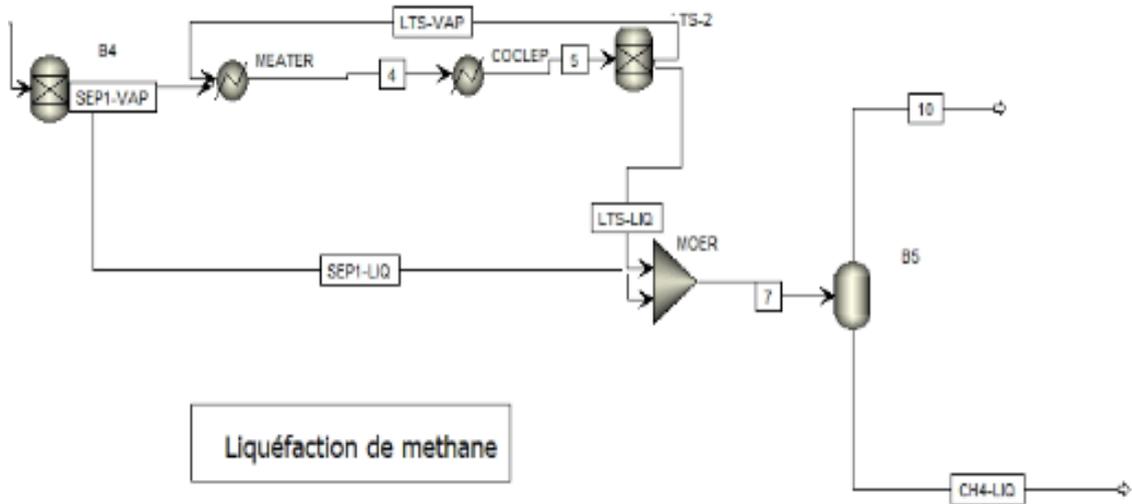
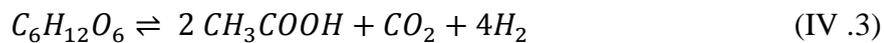


Figure (IV.48) : Diagramme fine de l'étape 3 (liquéfaction de méthane).

IV.1.2.2.Voie 2 : Production d'hydrogène par fermentation sombre:

La quatrième et dernière étape du procédé vise à produire de l'hydrogène directement à partir de la biomasse par fermentation sombre (*fermentation sombre*) et, un procédé biologique anaérobie se déroulant à température modérée (30–60 °C). Ce procédé implique l'action de bactéries spécialisées capables de convertir les substrats organiques en H₂ et CO₂, ainsi que des acides organiques comme l'acide acétique ou butyrique.

La réaction typique :



Dans Aspen Plus, ce procédé est modélisé à l'aide des unités

- COMPRESSEUR : Augmente la pression du flux gazeux pour atteindre les conditions de fonctionnement requises.

Tableau (IV. 10): de spécification de compresseur.

Dis charge pressure	16
Isentropique	0 ,75

- POMPE : Élève la pression du flux liquide pour assurer son acheminement efficace dans le procédé.

Tableau (IV. 11): spécification de pump.

Dis charge pressure	16
Pump	0,75

- HEATER 1 : Chauffe les flux d'alimentation pour atteindre la température optimale avant le mélange.

Tableau (IV. 12): spécification de HEATER 1.

Température	909 C°
Pressure	16 bar
Valide phases	Vapor-liquide

- HEATER 2. : Ajuste la température après la décomposition pour initier une réaction secondaire.

Tableau (IV. 13): spécification de HEATER 2.

Température	909 C°
Pressure	16 bar
Valide phases	Vapor-liquide

- MIXER 1 : Combine les flux chauffés et pressurisés pour former un courant homogène
- RSTOIC 1 : Simule la fermentation sombre en transformant la biomasse en hydrogène, CO₂ et autres produits

Tableau (IV. 14): spécification de RSTIOC 1.

Température	909 C°
Pressure	16 bar
Valide phases	Vapor-liquide

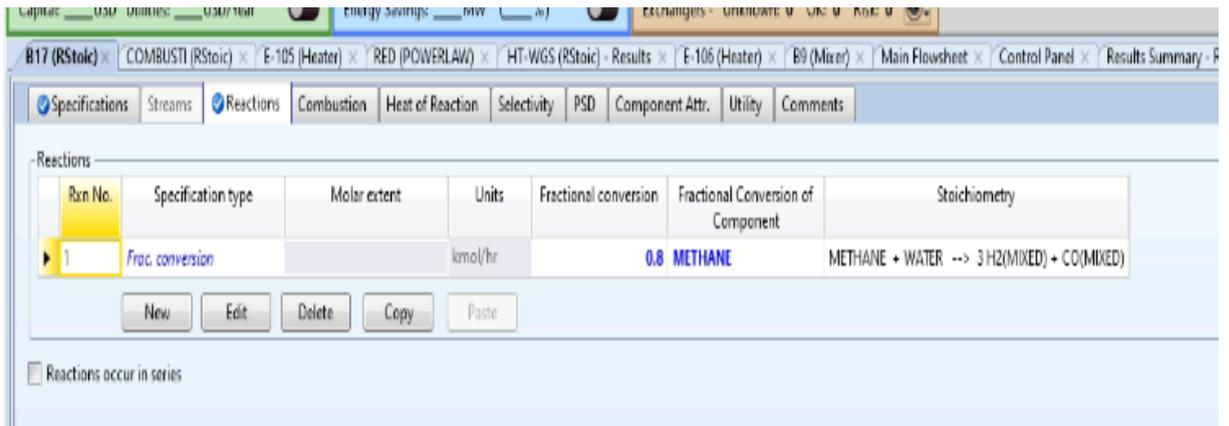


Figure (IV.49) : Spécification des réactifs et des produits pour la réaction.

- RGIBBS: Modélise la décomposition de la biomasse en composants élémentaires avec un rendement défini.

Tableau (IV. 15) : spécification de RGIBBS.

Température	909 C°
Pressure	16 bar

- RSTOIC 2 : Réalise une deuxième réaction pour convertir les produits intermédiaires en gaz riches en hydrogène.

Tableau (IV. 16) : spécification de RSTOIC 2.

Pressure	16 bar
Duty	0 KW

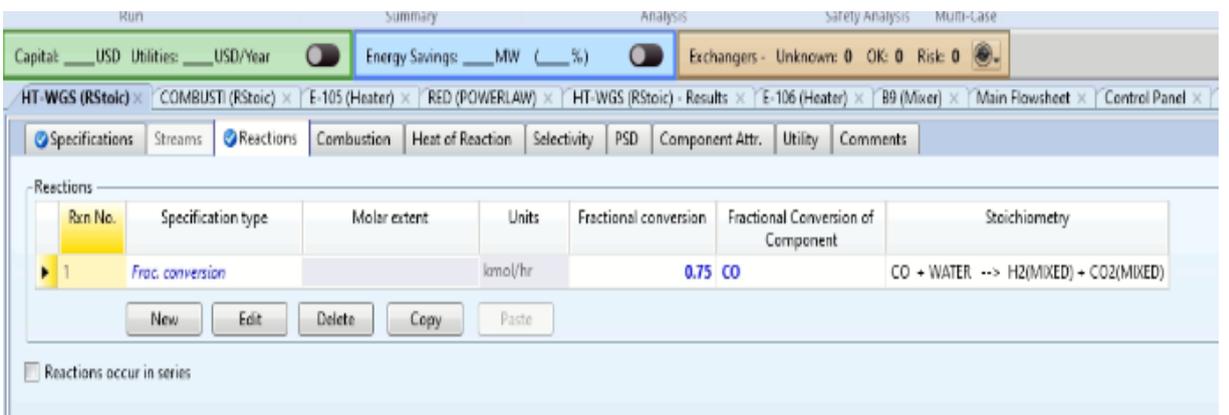


Figure (IV.50) : Spécification des réactifs et des produits pour la réaction.

- HEATER 3 : Réchauffe le flux pour lancer une troisième réaction.

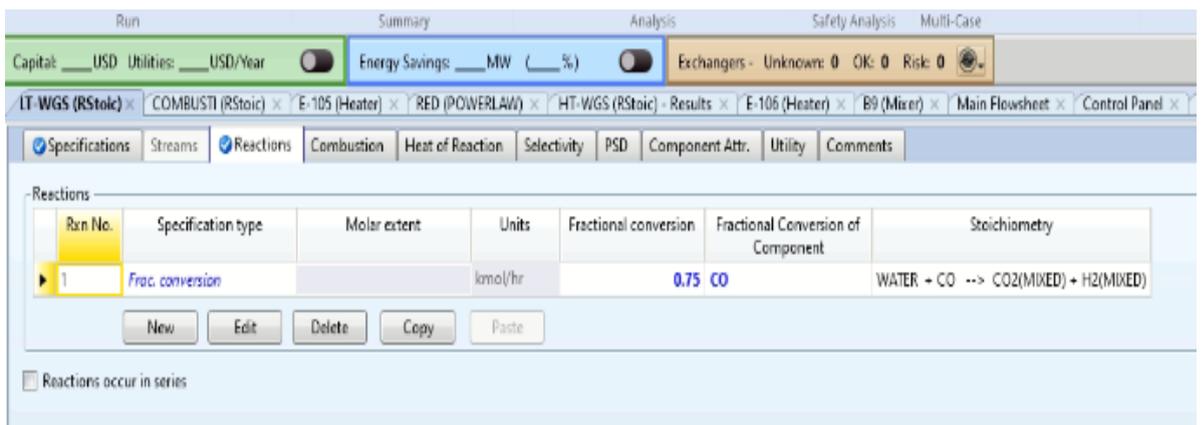
Tableau (IV. 17) : spécification de heater 3.

Température	350 C°
Pressure	16 bar

- RSTOIC 3 : Effectue une transformation complémentaire pour maximiser la conversion en hydrogène.

Tableau (IV. 18) : spécification de RSTOIC 3.

Pressure	15,7 bar
Duty	0 KW

**Figure (IV.51) : Spécification des réactifs et des produits pour la réaction.**

- HEATER 4 : Stabilise la température du flux pour assurer une séparation efficace dans FLASH2.

Tableau (IV. 19) : spécification de heater 4.

Température	210 C°
Pressure	16 bar

FLASH2 : Sépare le flux en deux phases (liquide et vapeur) selon les conditions thermodynamiques.

Tableau (IV. 20) : spécification de FLASHE 2.

température	38 C°
Pressure	15, 65 bar

- SEP : Sépare l'hydrogène des autres gaz ou liquides pour obtenir un flux purifié.

Component ID	Specification	Basis	Value	Units
C	Split fraction			
WATER	Split fraction			
S	Split fraction			
CO	Split fraction			
CO2	Split fraction			
N2	Split fraction			
O2	Split fraction			
CL2	Split fraction			
METHANE	Split fraction			
H2	Split fraction		0.79	
ETHANE	Split fraction			
PROPANE	Split fraction			
I-BUTANE	Split fraction			
N-BUTANE	Split fraction			
P-H2	Split fraction			
HE	Split fraction			

Figure (IV.52) : spécification de SEP (HYDROGENE).

- VALVE : Réduit la pression du flux en sortie de séparation pour adapter les conditions de pression.
- MIXER 2 : Combine les flux recyclés ou restants en un courant unique.
- HEATER 5 : Prépare thermiquement le flux combiné pour une dernière réaction.

Tableau (IV. 21) : spécification de heater 5.

Température	38 C°
Pressure	15 ,7 bar

- HEATER 6 : Chauffe final pour stabilisation du produit avant sortie ou stockage.

Tableau (IV. 22) : spécification de heater 6

température	250 C°
pression	1 bar

- RSTOIC 4 : Effectue une dernière transformation chimique pour optimiser la qualité de l'hydrogène.

Tableau (IV. 23) : spécification de RSTOIC 4.

pression	1 bar
Duty	0 KW

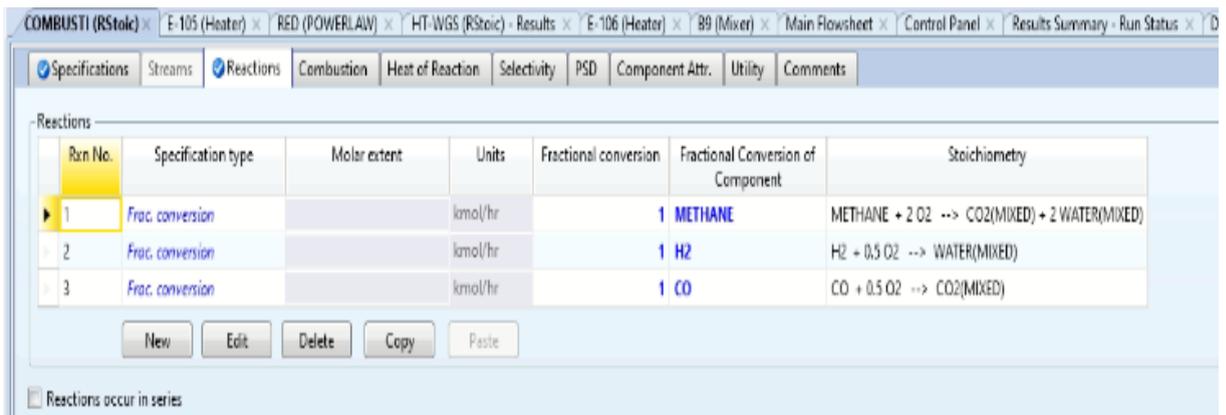


Figure (IV.53) : Spécification des réactifs et des produits pour la réaction.

- HEATER 7 : Assure le dernier chauffage du flux d'hydrogène pour stabiliser ses conditions avant le stockage ou l'utilisation, garantissant ainsi sa pureté et son état optimal.

Tableau (IV. 24) : spécification de HEATER 7.

température	200C°
Duty	1 KW

- L'interconnexion entre toutes les unités de procédé.

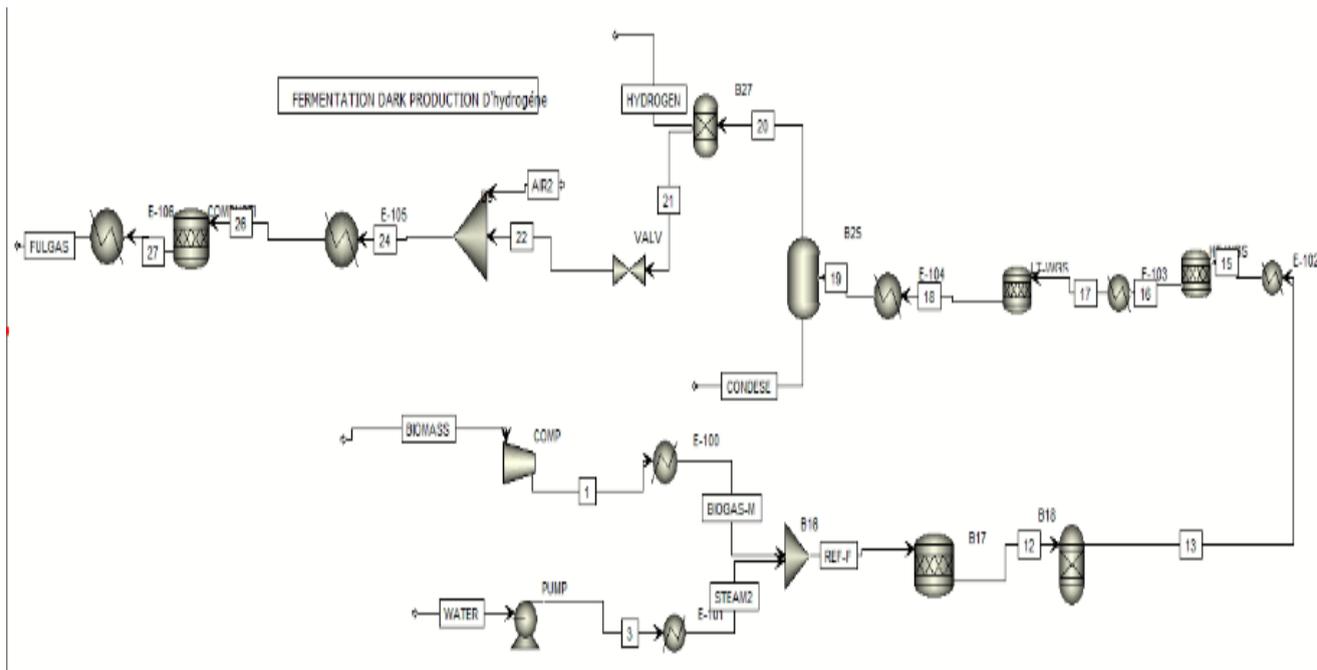


Figure (IV.54) : Diagramme de Production d'hydrogène par fermentation sombre

IV.1.3. Schéma global d'intégration des quatre étapes:

Dans cette section, nous allons relier les quatre étapes principales qui composent ce projet dans un schéma global unifié, afin de clarifier le flux de matière et la séquence des opérations dans le système simulé.

IV.1.3.1. Chainage des étapes et définition des flux de matière pour la

Voie 1 :

IV.1.3.1.1. Première étape : Gazéification de la biomasse :

Cette étape permet de transformer la biomasse en un mélange gazeux riche en méthane et en d'autres composés. Le flux d'alimentation "FEED"

Trois flux en sortent :

- "méthane" : utilisé comme entrée dans la deuxième étape de production d'hydrogène.
- " CH_4 " : envoyé vers la troisième étape pour la liquéfaction du méthane.
- " $\text{H}_2 + \text{CO}$ " : représente les gaz résiduels non exploités.

IV.1.3.1.2. Deuxième étape : Production d'hydrogène à partir du méthane :

Le méthane est transformé en hydrogène par des réactions chimiques, générant deux sorties :

- "H₂" : hydrogène produit.
- "RET" : gaz secondaires non convertis.

IV.1.3.1.3. Troisième étape : Liquéfaction du méthane :

Dans cette étape, le méthane est converti en phase liquide sous des conditions de température et de pression spécifiques. Deux sorties en résultent :

- "CH₄-liq" : méthane liquéfié,
- "10" : flux contenant les résidus non liquéfiés.

IV.1.3.2. Chainage des étapes et définition des flux de matière pour la**Voie 2:****IV.1.3.2.1. Première étape : Production biologique d'hydrogène par fermentation sombre :**

Le "biomasse " et " l'eau" sont introduites comme substrats microbiens, produisant :

- "hydrogène" : hydrogène biologique.
- "fuel -gas" : gaz secondaires issus de la fermentation.

La simulation est maintenant complète et prête au fonctionner. Cliquez sur le bouton bleu N pour ouvrir la fenêtre illustrée à (la figure IV.56). Ensuite, cliquez sur le bouton OK et la simulation s'exécute.

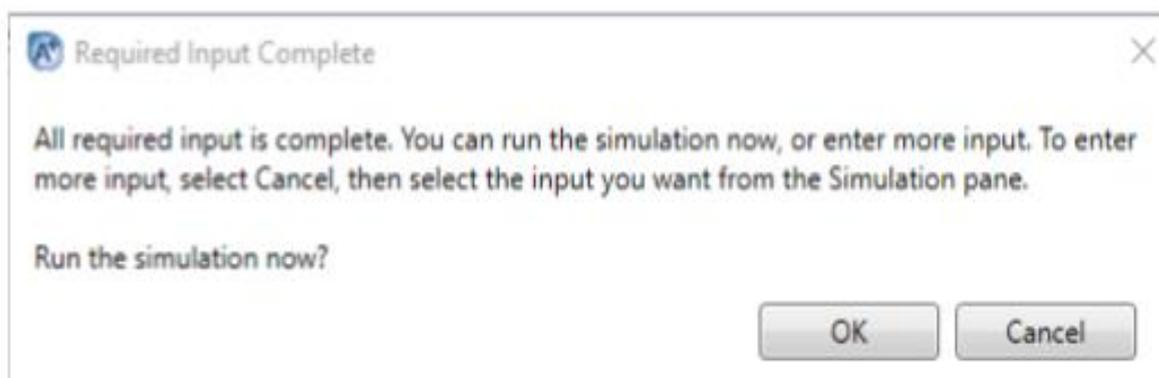


Figure (IV.56) : Exécution de la simulation.

IV.1.3.2.2. Deuxième étape : liquéfaction hydrogène

Dans cette étape, le méthane est converti en phase liquide sous des conditions de température et de pression spécifiques. Deux sorties en résultent :

- " H_2 -liq" : hydrogène liquéfié,
- "E-22" : flux contenant les résidus non liquéfiés.

Nous avons modélisé la liquéfaction de l'hydrogène à l'aide du simulateur 'Aspen' Plus. Le flux gazeux d'hydrogène, obtenu à la sortie de la section de production, est soumis à un refroidissement progressif jusqu'à une température de l'ordre de 20 K. Pour simuler cette étape, nous avons utilisé une série d'unités comprenant principalement :

- 8 unités MHEATX (Multi-Stream Heat Echangeurs) : utilisées pour effectuer un refroidissement progressif du flux d'hydrogène à travers plusieurs niveaux de température, en intégrant des fluides de réfrigération intermédiaires.
- 4 unités COMPR (Compressors) : permettent de comprimer l'hydrogène à différentes étapes pour optimiser le rendement du cycle et maintenir les pressions nécessaires aux échanges thermiques.

- 3 unités HEATER : configurées ici comme des refroidisseurs contrôlés, elles servent à ajuster précisément la température du flux avant les étapes de détente ou de conversion.
- 4 unités RCSTR (Continuons Stirred-Tank Réactors) : ces réacteurs simulent la conversion de l'ortho-hydrogène en para-hydrogène, une étape critique et exothermique, catalysée à différentes températures de refroidissement.
- 2 unités VALVE : utilisées pour réaliser des détente isenthalpique (effet Joule-Thomson), elles provoquent une chute importante de température à des points spécifiques, favorisant la liquéfaction du gaz.
- L'interconnexion entre les unités

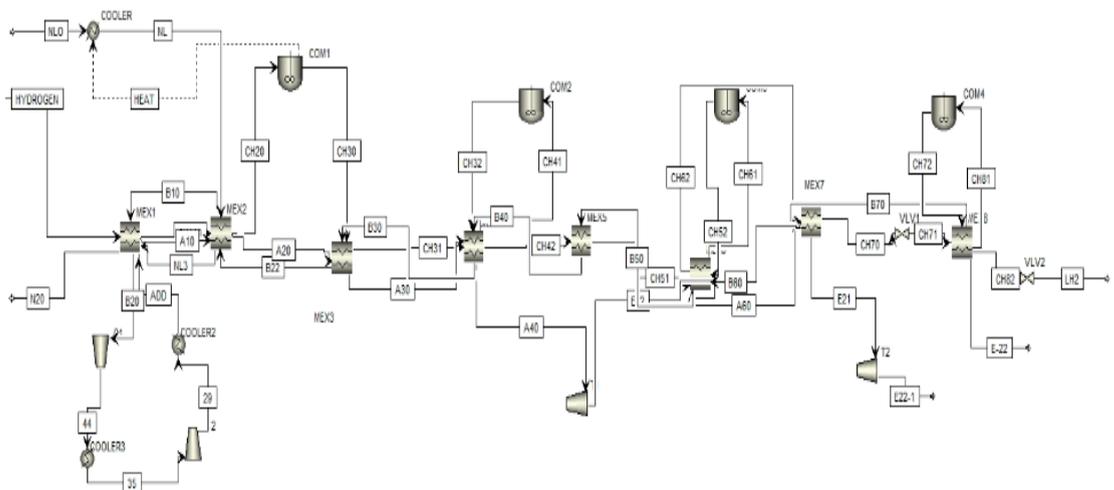


Figure (IV.57) : Diagramme de liquéfaction de l'hydrogène.

Ce montage modulaire permet une représentation fidèle d'un cycle de liquéfaction cryogénique dans un environnement de simulation, tout en respectant les paliers thermodynamiques nécessaires à l'obtention d'hydrogène liquide.

Malgré la mise en place d'un schéma complet pour la liquéfaction de l'hydrogène dans Aspen Plus, la simulation n'a pas abouti. Nous n'avons pas pu atteindre une température aussi basse que 20 K, en raison des limitations du simulateur et de l'absence d'un fluide réfrigérant fonctionnel dans l'environnement du logiciel. Bien que nous ayons introduit l'hélium parmi les composants, afin de l'utiliser comme fluide cryogénique (puisque'il est utilisé industriellement pour ses propriétés exceptionnelles à très basse température, avec un point d'ébullition de 4,2 K), la simulation a échoué à converger.

Ce résultat reflète en partie les difficultés réelles liées à cette technologie : la liquéfaction de l'hydrogène requiert des consommations énergétiques très élevées, des équipements cryogéniques spécialisés, ainsi qu'une gestion précise de la conversion ortho-para. De plus, des fluides comme l'azote liquide (77 K) peuvent être utiles pour le pré-refroidissement, mais sont insuffisants pour atteindre les températures extrêmes nécessaires. En réalité, aucun fluide frigorigère accessible et exploitable à grande échelle ne permet d'atteindre directement -253°C (20 K), ce qui rend la faisabilité industrielle très limitée, surtout dans les contextes où l'infrastructure cryogénique est absente ou difficile à mettre en œuvre.

Enfin, les contraintes de sécurité, les coûts élevés, et les pertes par évaporation (boil-off) compliquent davantage le déploiement industriel de cette technologie.

IV.2. Résultats :

Les flux d'entrée et de sortie du réacteur peuvent être vérifiés en cliquant sur Stream Résulte, (la figure IV.58).

Material	Heat	Lead	Work	Vol.% Curves	Wt.% Curves	Petroleum	Polymers	Solids	1	3	4	5	7	10	12	13	15	16	17	18	
Description																					
From									COMP	PUMP	MEATER	COCLER	MOER	B5	B17	B18	E-102	HT-WGS	E-103	LT	
To									E-100	E-101	COCLER	LTS-2	B5		B18	E-102	HT-WGS	E-103	LT-WGS	E-	
Stream Class									MIXCINC	MIXCINC	MIXCINC	MIXCINC	MIXCINC	MIXCINC	MIXCINC	MIXCINC	MIXCINC	MIXCINC	MIXCINC	MIXCINC	M
Maximum Relative Error																					
Cost Flow	\$/hr																				
- Total Stream																					
Temperature	C								315.207	25.1308	-100	-120	-95.0327			909	909	350	471.021	210	
Pressure	bar								16	16	30	30	0.813	30	16	16	16	16	16	16	16
Mass Vapor Fraction									1	0	0	0	1		1	1	1	1	1	1	1
Mass Liquid Fraction									0	1	1	1	0		0	0	0	0	0	0	0
Mass Solid Fraction									0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	0	0
Mass Enthalpy	cal/gm								-1661.43	-3814.38	-1265.12	-1288.8	-1171.01		-1676.84	-1579.64	-1890.76	-1890.76	-2043.56		
Mass Density	gm/cc								0.00892903	0.993831	0.301089	0.350835	0.00086795		0.0025807	0.0024415	0.00464436	0.00387792	0.00599946		
Enthalpy Flow	cal/sec								-17772.7	-48262.6	-6684.97	-6810.06	-4221.49		-39154.2	-36884.6	-44336	-44336	-47717.1		
Mass Flows	kg/hr								38.51	45.55	19.0226	19.0226	12.978	0	84.06						
BIOMASS	kg/hr								0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ASH	kg/hr								0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
C	kg/hr								0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
WATER	kg/hr								0	45.55	0	0	0	0	33.4025	30.8434	30.8434	19.589	19.589		
S	kg/hr								0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
CO	kg/hr								0	0	0	0	0	0	18.6871	23.3315	23.3315	5.83287	5.83287		

Navigation Panel														
	CO	kg/hr	0	0	0	0	0	0	18.8871	23.3315	23.3315	5.83287	5.83287	
	CO2	kg/hr	24.891	0	0	0	0	0	24.891	24.5502	24.5502	52.0439	52.0439	
	N2	kg/hr	0.0791005	0	0	0	0	0	0.0791005	0.0791005	0.0791005	0.0791005	0.0791005	
	O2	kg/hr	0.0180707	0	0	0	0	0	0.0180707	6.39021e-16	6.39021e-16	0	0	
	CL2	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
	METHANE	kg/hr	13.5218	0	19.0226	19.0226	12.978	0	2.70437	0.283141	0.283141	0.283141	0.283141	
	H2	kg/hr	0	0	0	0	0	0	4.07786	3.98338	3.98338	5.24273	5.24273	
	ETHANE	kg/hr	0	0	0	0	0	0	3.37275e-06	3.37275e-06	3.37275e-06	3.37275e-06		
	PROPANE	kg/hr	0	0	0	0	0	0	1.04825e-10	1.04825e-10	0	0		
	I-BUTANE	kg/hr	0	0	0	0	0	0	1.25887e-15	1.25887e-15	0	0		
	N-BUTANE	kg/hr	0	0	0	0	0	0	2.84327e-15	2.84327e-15	0	0		
	P-H2	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0.989321	0.989321	0.989321	0.989321		
	HE	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	

Navigation Panel														
	- Mass Fractions													
	BIOMASS		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	ASH		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	C		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	WATER		0	1	0	0	0	0	0.397365	0.366922	0.366922	0.233036	0.233036	
	S		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
	CO		0	0	0	0	0	0	0.224886	0.277557	0.277557	0.0693893	0.0693893	
	CO2		0.646352	0	0	0	0	0	0.29611	0.292055	0.292055	0.619128	0.619128	
	N2		0.0025402	0	0	0	0	0	0.000941	0.000941	0.000941	0.000941	0.000941	
	O2		0.000469248	0	0	0	0	0	0.000214974	7.60197e-18	7.60197e-18	0	0	
	CL2		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
	METHANE		0.351125	0	1	1	1	0	0.0321719	0.00336832	0.00336832	0.00336832	0.00336832	
	H2		0	0	0	0	0	0	0.0485113	0.0473873	0.0473873	0.0623689	0.0623689	
	ETHANE		0	0	0	0	0	0	4.01231e-08	4.01231e-08	4.01231e-08	4.01231e-08		
	PROPANE		0	0	0	0	0	0	0	1.24702e-12	1.24702e-12	0	0	
	I-BUTANE		0	0	0	0	0	0	0	1.49532e-17	1.49532e-17	0	0	
	N-BUTANE		0	0	0	0	0	0	0	3.50139e-17	3.50139e-17	0	0	
	P-H2		0	0	0	0	0	0	0	0.0117692	0.0117692	0.0117692	0.0117692	
	HE		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
	Volume Flow	l/min	71.6816	0.763879	1.05299	0.903682	243.595	0	542.876	573.828	301.656	361.276	233.521	
	- MIXED Substream													
	Phase		Vapor Phase	Liquid Phase	Liquid Phase	Liquid Phase	Vapor Phase		Vapor Phase	Ye				

	CL2	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
	METHANE	kmol/hr	0.842862	0	1.18574	1.18574	0.808964	0	0.168572	0.0176491	0.0176491	0.0176491		
	H2	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	2.02287	1.976	1.976	1.976		
	ETHANE	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0	1.12165e-07	1.12165e-07	1.12165e-07		
	PROPANE	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0	2.37716e-12	2.37716e-12	2.37716e-12		
	I-BUTANE	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0	2.16259e-17	2.16259e-17	2.16259e-17		
	N-BUTANE	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0	5.06383e-17	5.06383e-17	5.06383e-17		
	P-H2	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0	0.490764	0.490764	0.490764		
	HE	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
	- Mole Fractions													
	C		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
	WATER		0	1	0	0	0	0	0.350574	0.306269	0.306269	0.306269		
	S		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
	CO		0	0	0	0	0	0	0.127493	0.149006	0.149006	0.149006		
	CO2		0.4006	0	0	0	0	0	0.106939	0.0997896	0.0997896	0.0997896		
	N2		0.002	0	0	0	0	0	0.000533892	0.000505118	0.000505118	0.000505118		
	O2		0.0004	0	0	0	0	0	0.000106778	3.57242e-18	3.57242e-18	3.57242e-18		
	CL2		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
	METHANE		0.597	0	1	1	1	0	0.0318734	0.00315722	0.00315722	0.00315722		
	H2		0	0	0	0	0	0	0.38248	0.353482	0.353482	0.353482		
	ETHANE		0	0	0	0	0	0	0	2.00649e-08	2.00649e-08	2.00649e-08		
	PROPANE		0	0	0	0	0	0	0	4.25245e-13	4.25245e-13	4.25245e-13		
	I-BUTANE		0	0	0	0	0	0	0	3.8686e-18	3.8686e-18	3.8686e-18		
	N-BUTANE		0	0	0	0	0	0	0	9.05857e-18	9.05857e-18	9.05857e-18		

Temperature	C	315.207	25.1308	-100	-120	-95.0527		909	909	350
Pressure	bar	16	16	30	30	0.813	30	16	16	16
Molar Vapor Fraction		1	0	0	0	1		1	1	1
Molar Liquid Fraction		0	1	1	1	0		0	0	0
Molar Solid Fraction		0	0	0	0	0		0	0	0
Mass Vapor Fraction		1	0	0	0	1		1	1	1
Mass Liquid Fraction		0	1	1	1	0		0	0	0
Mass Solid Fraction		0	0	0	0	0		0	0	0
Molar Enthalpy	cal/mol	-45318.4	-68717.2	-20296.1	-20675.8	-18786.2		-26651.5	-23753.5	-28552.2
Mass Enthalpy	cal/gm	-1661.43	-3814.38	-1265.12	-1288.8	-1171.01		-1676.84	-1579.64	-1898.76
Molar Entropy	cal/mol-K	-8.50124	-40.1163	-38.0803	-40.4021	-23.0334		7.16249	8.27982	2.81649
Mass Entropy	cal/gm-K	-0.311667	-2.22679	-2.37368	-2.5184	-1.43575		0.450644	0.550618	0.1873
Molar Density	mol/cc	0.00032735	0.055166	0.0187679	0.0218687	5.5349e-05		0.00016237	0.000162363	0.000308856
Mass Density	gm/cc	0.00892903	0.993831	0.301089	0.350835	0.00088795		0.0025807	0.0024415	0.00464436
Enthalpy Flow	cal/sec	-17772.7	-48262.6	-6684.97	-6810.06	-4221.49		-39154.2	-36884.6	-44336
Average MW		27.2767	18.0153	16.0428	16.0428	16.0428		15.8939	15.0373	15.0373
- Mole Flows	kmol/hr	1.41183	2.52841	1.18574	1.18574	0.808964	0	5.28882	5.5901	5.5901
C	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0
WATER	kmol/hr	0	2.52841	0	0	0	0	1.85412	1.71207	1.71207
S	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0
CO	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0.674289	0.832957	0.832957
CO2	kmol/hr	0.565579	0	0	0	0	0	0.565579	0.557834	0.557834
N2	kmol/hr	0.00282366	0	0	0	0	0	0.00282366	0.00282366	0.00282366
O2	kmol/hr	0.000564731	0	0	0	0	0	0.000564731	1.99702e-17	1.99702e-17
CL2	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0

N-BUTANE		0	0	0	0	0	0	9.05857e-18	9.05857e-18	
P-H2		0	0	0	0	0	0	0.0877916	0.0877916	
HE		0	0	0	0	0	0	0	0	0
+ Mass Flows	kg/hr	38.51	45.55	19.0226	19.0226	12.978		84.06	84.06	84.06
+ Mass Fractions										
Volume Flow	l/min	71.8816	0.763879	1.05299	0.903682	243.595		542.876	573.828	301.656
- Vapor Phase										
Molar Enthalpy	cal/mol	-45318.4				-18786.2		-26651.5	-23753.5	-28552.2
Mass Enthalpy	cal/gm	-1661.43				-1171.01		-1676.84	-1579.64	-1898.76
Molar Entropy	cal/mol-K	-8.50124				-23.0334		7.16249	8.27982	2.81649
Mass Entropy	cal/gm-K	-0.311667				-1.43575		0.450644	0.550618	0.1873
Molar Density	mol/cc	0.00032735				5.5349e-05		0.00016237	0.000162363	0.000308856
Mass Density	gm/cc	0.00892903				0.00088795		0.0025807	0.0024415	0.00464436
Enthalpy Flow	cal/sec	-17772.7				-4221.49		-39154.2	-36884.6	-44336
Average MW		27.2767				16.0428		15.8939	15.0373	15.0373
+ Mole Flows	kmol/hr	1.41183				0.808964		5.28882	5.5901	5.5901
+ Mole Fractions										
+ Mass Flows	kg/hr	38.51				12.978		84.06	84.06	84.06
+ Mass Fractions										
Volume Flow	l/min	71.8816				243.595		542.876	573.828	301.656
- Liquid Phase										
Molar Enthalpy	cal/mol		-68717.2	-20296.1	-20675.8					
Mass Enthalpy	cal/gm		-3814.38	-1265.12	-1288.8					
Molar Entropy	cal/mol-K		-40.1163	-38.0803	-40.4021					
Mass Entropy	cal/gm-K		-2.22679	-2.37368	-2.5184					

	Units	1	3	4	5	7	10	12	13	15	16
Molar Density	mol/cc										
Mass Density	gm/cc										
Enthalpy Flow	cal/sec										
Average MW											
+ Mole Flows	kmol/hr	0									
+ Mole Fractions											
+ Mass Flows	kg/hr										
+ Mass Fractions											
Volume Flow	l/min										
- NC Substream											
Temperature	C										
Pressure	bar	16	16	30	30	0.813	30	16			16
Mass Enthalpy	cal/gm										
Mass Density	gm/cc										
Enthalpy Flow	cal/sec										
- Mass Flows	kg/hr	0									
BIOMASS	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ASH	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
- Mass Fractions											
BIOMASS		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ASH		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Volume Flow	l/min										
+ Component Attributes											
<add properties>											

Mass Enthalpy	cal/gm										
Molar Entropy	cal/mol-K										
Mass Entropy	cal/gm-K										
Molar Density	mol/cc										
Mass Density	gm/cc										
Enthalpy Flow	cal/sec										
Average MW											
+ Mole Flows	kmol/hr	2.52841	1.18574	1.18574							
+ Mole Fractions											
+ Mass Flows	kg/hr	45.55	19.0226	19.0226							
+ Mass Fractions											
Volume Flow	l/min	0.763879	1.05299	0.903682							
- CISOLID Substream											
Temperature	C										
Pressure	bar	16	16	30	30	0.813	30	16			16
Molar Liquid Fraction											
Molar Solid Fraction											
Mass Liquid Fraction											
Mass Solid Fraction											
Molar Enthalpy	cal/mol										
Mass Enthalpy	cal/gm										
Molar Entropy	cal/mol-K										
Mass Entropy	cal/gm-K										
Molar Density	mol/cc										
Mass Density	gm/cc										

Material	Heat	Load	Work	Vol. % Curves	Wt. % Curves	Petroleum	Polymers	Solids													
	Units	17	18	19	20	21	22	24	26	27	AIR	AIR2									
Description																					
From		E-103	LT-WGS	E-104	B25	B27	VALV	VALV	B9	E-105	COMBUSTI	COMBUSTI									
To		LT-WGS	E-104	B25	B27	VALV	B9	E-105	COMBUSTI	E-106	COMBUSTI	B6	B9	E-							
Stream Class		MIXCINC	MIXCINC	MIXCINC	MIXCINC	MIXCINC	MIXCINC	MIXCINC	MIXCINC	MIXCINC	MIXCINC	MIXCINC	MIXCINC	M							
Maximum Relative Error																					
Cost Flow	\$/hr																				
- Total Stream																					
Temperature	C	210	242.121	30	30	30	27.3808	26.1255	250	1074.05	65	25									
Pressure	bar	16	15.7	15.7	15.65	15.65	1	1	1	1	1	1									
Mass Vapor Fraction		1	1	0.004299	1	0.997687	1	1	1	1	1	1									
Mass Liquid Fraction		0	0	0.195701	0	0.00231342	0	0	0	0	0	0									
Mass Solid Fraction		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0									
Mass Enthalpy	cal/gm	-2043.96	-2043.96	-2268.61	-1895.96	-2032.83	-2032.83	-827.463	-764.018	-764.018	9.64689	-0.066827									
Mass Density	gm/cc	0.00599946	0.0050945	0.0109149	0.00876993	0.0157143	0.00101415	0.00110128	0.000629246	0.000258729	0.00102334	0.00117091									
Enthalpy Flow	cal/sec	-47717.1	-47717.1	-52972.1	-35607.3	-35698.7	-35698.7	-35700.4	-32963.1	-32963.1	267.999	-1.70996									
- Mass Flows	kg/hr	84.06	84.06	84.06	67.6104	63.2199	63.2199	155.32	155.32	155.32	100	92.1									
BIOMASS	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0									
ASH	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0									
C	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0									
WATER	kg/hr	19.589	16.7754	16.7754	0.328302	0.328302	0.328302	0.328302	0.328302	11.3941	0	0									
S	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0									
CO	kg/hr	5.83287	1.45822	1.45822	1.45822	1.45822	1.45822	1.45822	1.45822	0	0	0									

CO	kg/hr	5.83287	1.45822	1.45822	1.45822	1.45822	1.45822	1.45822	1.45822	0
CO2	kg/hr	52.0439	58.9173	58.9173	58.9173	58.9147	58.9147	58.9147	58.9147	61.9826
N2	kg/hr	0.0791005	0.0791005	0.0791005	0.0791004	0.0791004	0.0791004	66.7817	66.7817	66.7817
O2	kg/hr	0	0	0	0	0	0	25.3974	25.3974	14.1721
CL2	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0
METHANE	kg/hr	0.283141	0.283141	0.283141	0.28314	0.28314	0.28314	0.28314	0.28314	0
H2	kg/hr	5.24273	5.55757	5.55757	5.55757	1.16709	1.16709	1.16709	1.16709	0
ETHANE	kg/hr	3.37275e-06	3.37275e-06	3.37275e-06	3.37273e-06	3.37273e-06	3.37273e-06	3.37273e-06	3.37273e-06	3.37273e-06
PROPANE	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0
I-BUTANE	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0
N-BUTANE	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0
P-H2	kg/hr	0.989321	0.989321	0.989321	0.98932	0.98932	0.98932	0.98932	0.98932	0.98932
HE	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0
- Mass Fractions										
BIDMASS		0	0	0	0	0	0	0	0	0
ASH		0	0	0	0	0	0	0	0	0
C		0	0	0	0	0	0	0	0	0
WATER		0.233036	0.199564	0.199564	0.00485579	0.00519302	0.00519302	0.00211372	0.00211372	0.073359
S		0	0	0	0	0	0	0	0	0
CO		0.0693893	0.0173473	0.0173473	0.0215679	0.0230658	0.0230658	0.00938847	0.00938847	0
CO2		0.619128	0.700896	0.700896	0.871386	0.931902	0.931902	0.379312	0.379312	0.399064
N2		0.000941	0.000941	0.000941	0.00116995	0.0012512	0.0012512	0.429963	0.429963	0.429963
O2		0	0	0	0	0	0	0.163516	0.163516	0.0912447
CL2		0	0	0	0	0	0	0	0	0
FACTRIANE		0.00336023	0.00336023	0.00336023	0.00419793	0.00417665	0.00417665	0.00187305	0.00187305	0

Material	Heat	Load	Work	Vol.% Curves	Wt.% Curves	Petroleum	Polymers	Solids	Units									
									17	18	19	20	21	22	24	26	27	All
METHANE									0.00336832	0.00336832	0.00336832	0.00418782	0.00447865	0.00447865	0.00182295	0.00182295	0	0
H2									0.0623689	0.0661144	0.0661144	0.0821999	0.0184608	0.0184608	0.0075141	0.0075141	0	0
ETHANE									4.01231e-08	4.01231e-08	4.01231e-08	4.98846e-08	5.33492e-08	5.33492e-08	2.17147e-08	2.17147e-08	2.17147e-08	2.17147e-08
PROPANE									0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
I-BUTANE									0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
N-BUTANE									0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
P-H2									0.0117692	0.0117692	0.0117692	0.0146327	0.0156489	0.0156489	0.00636956	0.00636956	0.00636956	0.00636956
HE									0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Volume Flow									l/min	233.521	254.29	128.357	128.489	67.0512	1038.97	2350.6	4113.91	10005.3
- MIXED Substream																		
Phase										Vapor Phase								
Temperature									C	210	242.121	38	38	38	27.3808	26.1255	250	1074.05
Pressure									bar	16	15.7	15.7	15.65	15.65	1	1	1	1
Molar Vapor Fraction										1	1	0.836664	1	0.999752	1	1	1	1
Molar Liquid Fraction										0	0	0.163336	0	0.00324792	0	0	0	0
Molar Solid Fraction										0	0	0	0	0	0	0	0	0
Mass Vapor Fraction										1	1	0.804299	1	0.997687	1	1	1	1
Mass Liquid Fraction										0	0	0.195701	0	0.00231342	0	0	0	0
Mass Solid Fraction										0	0	0	0	0	0	0	0	0
Molar Enthalpy									cal/mol	-30729.6	-30729.6	-34113.8	-27407.3	-51423.8	-51423.8	-22651.2	-20914.5	-22145.9
Mass Enthalpy									cal/gm	-2043.56	-2043.56	-2268.61	-1895.96	-2032.83	-2032.83	-827.463	-764.018	-764.018
Molar Entropy									cal/mol-K	-0.479971	-0.35325	-9.05872	-3.15017	-2.99024	2.42098	3.0575	7.37544	14.4878
Mass Entropy									cal/gm-K	-0.0319187	-0.0234916	-0.602416	-0.217919	-0.118207	0.0957034	0.111692	0.269429	0.499819
Molar Density									mol/cc	0.000398972	0.000366385	0.000725853	0.000606678	0.000621202	4.00901e-05	4.02303e-05	2.29867e-05	8.92395e-06
Mass Density									gm/cc	0.00599946	0.00550945	0.0109149	0.00876993	0.0157143	0.00101415	0.00110128	0.000629246	0.000258729

Molar Density	mol/cc	0.000398972	0.000366385	0.000725853	0.000606678	0.000621202	4.00901e-05	4.02303e-05	2.29867e-05	8.92395e-06
Mass Density	gm/cc	0.00599946	0.00550945	0.0109149	0.00876993	0.0157143	0.00101415	0.00110128	0.000629246	0.000258729
Enthalpy Flow	cal/sec	-47717.1	-47717.1	-52972.1	-35607.3	-35698.7	-35698.7	-35700.4	-32963.1	-32963.1
Average MW		15.0373	15.0373	15.0373	14.4557	25.2967	25.2967	27.3743	27.3743	28.9861
- Mole Flows										
C	kmol/hr	5.5901	5.5901	5.5901	4.67709	2.49914	2.49914	5.67393	5.67393	5.35842
WATER	kmol/hr	1.08735	0.931174	0.931174	0.0182235	0.0182235	0.0182235	0.0182235	0.0182235	0.632469
S	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0
CO	kmol/hr	0.208239	0.0520598	0.0520598	0.0520598	0.0520598	0.0520598	0.0520598	0.0520598	0
CO2	kmol/hr	1.18255	1.33873	1.33873	1.33867	1.33867	1.33867	1.33867	1.33867	1.40838
N2	kmol/hr	0.00282366	0.00282366	0.00282366	0.00282366	0.00282366	0.00282366	2.38391	2.38391	2.38391
O2	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0.793697	0.793697	0.442895
CL2	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0
METHANE	kmol/hr	0.0176491	0.0176491	0.0176491	0.0176491	0.0176491	0.0176491	0.0176491	0.0176491	0
H2	kmol/hr	2.60072	2.7569	2.7569	2.75689	0.578948	0.578948	0.578948	0.578948	0
ETHANE	kmol/hr	1.12165e-07	1.12165e-07	1.12165e-07	1.12164e-07	1.12164e-07	1.12164e-07	1.12164e-07	1.12164e-07	1.12164e-07
PROPANE	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0
I-BUTANE	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0
N-BUTANE	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0
P-H2	kmol/hr	0.490764	0.490764	0.490764	0.490763	0.490763	0.490763	0.490763	0.490763	0.490763
HE	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0
- Mole Fractions										
C		0	0	0	0	0	0	0	0	0
WATER		0.194514	0.166576	0.166576	0.00389634	0.00729192	0.00729192	0.0032118	0.0032118	0.118033
S		0	0	0	0	0	0	0	0	0

CO		0.0372515	0.00931286	0.00931286	0.0111308	0.0208311	0.0208311	0.00917527	0.00917527	0
CO2		0.211544	0.239483	0.239483	0.286219	0.535653	0.535653	0.235934	0.235934	0.262835
N2		0.000505118	0.000505118	0.000505118	0.000603721	0.00112985	0.00112985	0.420152	0.420152	0.444891
O2		0	0	0	0	0	0	0.139885	0.139885	0.082654
CL2		0	0	0	0	0	0	0	0	0
METHANE		0.00315722	0.00315722	0.00315722	0.00377352	0.00706206	0.00706206	0.00311056	0.00311056	0
H2		0.465236	0.493175	0.493175	0.589447	0.231659	0.231659	0.102037	0.102037	0
ETHANE		2.00649e-08	2.00649e-08	2.00649e-08	2.39816e-08	4.4881e-08	4.4881e-08	1.97683e-08	1.97683e-08	2.09323e-08
PROPANE		0	0	0	0	0	0	0	0	0
I-BUTANE		0	0	0	0	0	0	0	0	0
N-BUTANE		0	0	0	0	0	0	0	0	0
P-H2		0.0877916	0.0877916	0.0877916	0.104929	0.196373	0.196373	0.0864944	0.0864944	0.0913872
HE		0	0	0	0	0	0	0	0	0
➔ Mass Flows	kg/hr	84.06	84.06	84.06	67.6104	63.2199	63.2199	155.32	155.32	155.32
➔ Mass Fractions										
Volume Flow	l/min	233.521	254.29	128.357	128.489	67.0512	1038.97	2350.6	4113.91	10005.3
- Vapor Phase										
Molar Enthalpy	cal/mol	-30729.6	-30729.6	-27407	-27407.3	-51368.2	-51423.8	-22651.2	-20914.5	-22145.9
Mass Enthalpy	cal/gm	-2043.56	-2043.56	-1895.94	-1895.96	-2028.73	-2032.83	-827.463	-764.018	-764.018
Molar Entropy	cal/mol-K	-0.479971	-0.35325	-3.15665	-3.15017	-2.87196	2.42098	3.0575	7.37544	14.4878
Mass Entropy	cal/gm-K	-0.0319187	-0.0234916	-0.218369	-0.217919	-0.113425	0.0957034	0.111692	0.269429	0.499819
Molar Density	mol/cc	0.000398972	0.000366385	0.00060862	0.000606678	0.000619207	4.00901e-05	4.02303e-05	2.29867e-05	8.92395e-06
Mass Density	gm/cc	0.00599946	0.00550945	0.00879798	0.00876993	0.0156786	0.00101415	0.00110128	0.000629246	0.000258729
Enthalpy Flow	cal/sec	-47717.1	-47717.1	-35606.6	-35607.3	-35444.3	-35688.7	-35700.4	-32963.1	-32963.1
Average MW		15.0373	15.0373	14.4556	14.4557	25.3204	25.2967	27.3743	27.3743	28.9861

Average MW		15.0373	15.0373	14.4556	14.4557	25.3204	25.2967	27.3743	27.3743	28.9861
➔ Mole Flows	kmol/hr	5.5901	5.5901	4.67703	4.67709	2.49102	2.49914	5.67393	5.67393	5.35842
➔ Mole Fractions										
➔ Mass Flows	kg/hr	84.06	84.06	67.6094	67.6104	63.0736	63.2199	155.32	155.32	155.32
➔ Mass Fractions										
Volume Flow	l/min	233.521	254.29	128.078	128.489	67.0488	1038.97	2350.6	4113.91	10005.3
- Liquid Phase										
Molar Enthalpy	cal/mol			-68468.2		-68469.4				
Mass Enthalpy	cal/gm			-3800.22		-3800				
Molar Entropy	cal/mol-K			-39.2911		-39.2887				
Mass Entropy	cal/gm-K			-2.18079		-2.18049				
Molar Density	mol/cc			0.0544684		0.0544657				
Mass Density	gm/cc			0.981352		0.981378				
Enthalpy Flow	cal/sec			-17365.5		-154.38				
Average MW				18.0169		18.0183				
➔ Mole Flows	kmol/hr			0.913065		0.008117				
➔ Mole Fractions										
➔ Mass Flows	kg/hr			16.4506		0.146254				
➔ Mass Fractions										
Volume Flow	l/min			0.279386		0.00248383				
- CISOLID Substream										
Temperature	C									
Pressure	bar	16	15.7	15.7	15.65	15.65	1	1	1	1
Molar Liquid Fraction										
Molar Solid Fraction										

	Units	AIR	AIR2	BIOGAS-M	BIOMASS	CAH10L	C-FD	CH4	CONDESE	FEED	FL
Description											
From				E-100		B5	B1	B2	B25		E-
To		B6	B9	B16	COMP		B2	B4		DECOUP	
Stream Class		MIXCINC	MIXCINC	MIXCINC	MIXCINC	MIXCINC	MIXCINC	MIXCINC	MIXCINC	MIXCINC	MI
Maximum Relative Error											
Cost Flow	\$/hr										
- Total Stream											
Temperature	C	65	25	909	25	-110	25	25	38	700	
Pressure	bar	1	1	16	1	30	0.813	0.813	15.65	1.01325	
Mass Vapor Fraction		1	1	1	1	0	0.979706	1	0	0	
Mass Liquid Fraction		0	0	0	0	1	0.0202945	0	1	0	
Mass Solid Fraction		0	0	0	0	0	0	0	0	1	
Mass Enthalpy	cal/gm	9.64689	-0.066827	-1343.13	-1770.14	-1278.05	-1044.61	-1109.68	-3800.22	-871.817	
Mass Density	gm/cc	0.00102334	0.00117091	0.00442387	0.00110385	0.32835	0.000481538	0.000527097	0.981352	1.33856	
Enthalpy Flow	cal/sec	267.969	-1.70966	-14367.7	-18935.6	-4607.37	-1.11922e+06	-4000.4	-17364.5	-1.21086e+06	
- Mass Flows	kg/hr	100	92.1	38.51	38.51	12.978	3857.1	12.978	16.4496	5000	
BIOMASS	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	5000	
ASH	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
C	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
WATER	kg/hr	0	0	0	0	0	209.689	0	16.4471	0	
S	kg/hr	0	0	0	0	0	9.38385	0	0	0	
CO	kg/hr	0	0	0	0	0	2762.22	0	5.62329e-07	0	
CO2	kg/hr	0	0	24.891	24.891	0	322.352	0	0.0025557	0	
N2	kg/hr	79	66.7026	0.0791005	0.0791005	0	236.197	0	3.81233e-08	0	
O2	kg/hr	21	25.3974	0.0180707	0.0180707	0	0	0	0	0	

Molar Density	mol/cc									
Mass Density	gm/cc									
Enthalpy Flow	cal/sec									
Average MW										
◆ Mole Flows	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0
◆ Mole Fractions										
◆ Mass Flows	kg/hr									
◆ Mass Fractions										
Volume Flow	l/min									
- NC Substream										
Temperature	C									
Pressure	bar	16	15.7	15.7	15.65	15.65	1	1	1	1
Mass Enthalpy	cal/gm									
Mass Density	gm/cc									
Enthalpy Flow	cal/sec									
- Mass Flows	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0
BIOMASS	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ASH	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0
- Mass Fractions										
BIOMASS		0	0	0	0	0	0	0	0	0
ASH		0	0	0	0	0	0	0	0	0
Volume Flow	l/min									
◆ Component Attributes										
<add properties>										
▶ Molar Solid Fraction										
▶ Mass Liquid Fraction										
▶ Mass Solid Fraction										
▶ Molar Enthalpy	cal/mol									
▶ Mass Enthalpy	cal/gm									
▶ Molar Entropy	cal/mol-K									
▶ Mass Entropy	cal/gm-K									
▶ Molar Density	mol/cc									
▶ Mass Density	gm/cc									
▶ Enthalpy Flow	cal/sec									
▶ Average MW										
◆ Mole Flows	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0
◆ Mole Fractions										
◆ Mass Flows	kg/hr									
◆ Mass Fractions										
Volume Flow	l/min									
- NC Substream										
Temperature	C									
Pressure	bar	16	15.7	15.7	15.65	15.65	1	1	1	1
Mass Enthalpy	cal/gm									
Mass Density	gm/cc									
Enthalpy Flow	cal/sec									
- Mass Flows	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0
BIOMASS	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ASH	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0
CL2	kg/hr	0	0	0	0	0	5.80905	0	0	0
METHANE	kg/hr	0	0	13.5218	13.5218	12.978	32.4451	12.978	1.14485e-06	0
H2	kg/hr	0	0	0	0	0	223.596	0	4.2211e-06	0
ETHANE	kg/hr	0	0	0	0	0	0.000366858	0	1.43692e-11	0
PROPANE	kg/hr	0	0	0	0	0	1.19184e-08	0	0	0
I-BUTANE	kg/hr	0	0	0	0	0	1.61922e-13	0	0	0
N-BUTANE	kg/hr	0	0	0	0	0	3.47026e-13	0	0	0
P-H2	kg/hr	0	0	0	0	0	55.408	0	1.39363e-06	0
HE	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0
- Mass Fractions										
BIOMASS		0	0	0	0	0	0	0	0	1
ASH		0	0	0	0	0	0	0	0	0
C		0	0	0	0	0	0	0	0	0
WATER		0	0	0	0	0	0.0543643	0	0.999844	0
S		0	0	0	0	0	0.00243287	0	0	0
CO		0	0	0	0	0	0.716139	0	3.41849e-08	0
CO2		0	0	0.646352	0.646352	0	0.0835736	0	0.000155365	0
N2		0.79	0.724242	0.00205402	0.00205402	0	0.0612368	0	2.31756e-09	0
O2		0.21	0.275758	0.000469248	0.000469248	0	0	0	0	0
CL2		0	0	0	0	0	0.00130607	0	0	0
METHANE		0	0	0.351125	0.351125	1	0.00641177	1	6.95971e-08	0
H2		0	0	0	0	0	0.05797	0	2.56608e-07	0
ETHANE		0	0	0	0	0	9.51123e-08	0	8.73329e-13	0
PROPANE		0	0	0	0	0	3.08999e-12	0	0	0
I-BUTANE		0	0	0	0	0	4.19803e-17	0	0	0

>	I-BUTANE		0	0	0	0	0	4.19803e-17	0	0	0	0
>	N-BUTANE		0	0	0	0	0	8.99705e-17	0	0	0	0
>	P-H2		0	0	0	0	0	0.0143652	0	8.47211e-08	0	0
>	HE		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
>	Volume Flow	l/min	1628.65	1310.95	145.084	581.448	0.638749	133499	410.362	0.27937	62.2558	
>	- MIXED Substream											
>	Phase		Vapor Phase	Vapor Phase	Vapor Phase	Vapor Phase	Liquid Phase		Vapor Phase	Liquid Phase		V
>	Temperature	C	65	25	909	25	-110	25	25	38		
>	Pressure	bar	1	1	16	1	30	0.813	0.813	15.65	1.01325	
>	Molar Vapor Fraction		1	1	1	1	0	0.98457	1	0		
>	Molar Liquid Fraction		0	0	0	0	1	0.0154298	0	1		
>	Molar Solid Fraction		0	0	0	0	0	0	0	0		
>	Mass Vapor Fraction		1	1	1	1	0	0.979706	1	0		
>	Mass Liquid Fraction		0	0	0	0	1	0.0202945	0	1		
>	Mass Solid Fraction		0	0	0	0	0	0	0	0		
>	Molar Enthalpy	cal/mol	277.501	-1.93864	-36636.1	-48283.5	-20503.4	-15101.3	-17802.3	-68468.2		
>	Mass Enthalpy	cal/gm	9.64689	-0.066827	-1343.13	-1770.14	-1278.05	-1044.61	-1109.68	-3800.22		
>	Molar Entropy	cal/mol-K	1.8622	1.13745	1.30521	-9.83381	-39.3123	9.60164	-18.8212	-39.2911		
>	Mass Entropy	cal/gm-K	0.0647366	0.0392092	0.0551831	-0.360521	-2.45047	0.664181	-1.17319	-2.18079		
>	Molar Density	mol/cc	3.5575e-05	4.03626e-05	0.000162185	4.04686e-05	0.0204672	3.33096e-05	3.28556e-05	0.0544684		
>	Mass Density	gm/cc	0.00102334	0.00117091	0.00442387	0.00110385	0.32835	0.000481538	0.000527097	0.981352		
>	Enthalpy Flow	cal/sec	267.969	-1.70966	-14367.7	-18935.6	-4607.37	-1.11922e+06	-4000.4	-17364.5		
>	Average MW		28.7658	29.0098	27.2767	27.2767	16.0428	14.4564	16.0428	18.0169		
>	- Mole Flows	kmol/hr	3.47635	3.17479	1.41183	1.41183	0.808964	266.81	0.808964	0.913911	0	
>	C	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
>	François (Franco) Clément (Francis)											

>	C	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
>	WATER	kmol/hr	0	0	0	0	0	11.6395	0	0.91295	0	0
>	S	kmol/hr	0	0	0	0	0	0.292642	0	0	0	0
>	CO	kmol/hr	0	0	0	0	0	98.6142	0	2.00757e-08	0	0
>	CO2	kmol/hr	0	0	0.565579	0.565579	0	7.32456	0	5.80711e-05	0	0
>	N2	kmol/hr	2.82007	2.38109	0.00282366	0.00282366	0	8.43154	0	1.36089e-09	0	0
>	O2	kmol/hr	0.656275	0.793697	0.000564731	0.000564731	0	0	0	0	0	0
>	CL2	kmol/hr	0	0	0	0	0	0.0819268	0	0	0	0
>	METHANE	kmol/hr	0	0	0.842862	0.842862	0.808964	2.02241	0.808964	7.13622e-08	0	0
>	H2	kmol/hr	0	0	0	0	0	110.918	0	2.09393e-06	0	0
>	ETHANE	kmol/hr	0	0	0	0	0	1.22003e-05	0	4.77865e-13	0	0
>	PROPANE	kmol/hr	0	0	0	0	0	2.7028e-10	0	0	0	0
>	I-BUTANE	kmol/hr	0	0	0	0	0	2.78584e-15	0	0	0	0
>	N-BUTANE	kmol/hr	0	0	0	0	0	5.8705e-15	0	0	0	0
>	P-H2	kmol/hr	0	0	0	0	0	27.4858	0	6.91326e-07	0	0
>	HE	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
>	- Mole Fractions											
>	C		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
>	WATER		0	0	0	0	0	0.0436246	0	0.999933	0	0
>	S		0	0	0	0	0	0.00109682	0	0	0	0
>	CO		0	0	0	0	0	0.369604	0	2.19885e-08	0	0
>	CO2		0	0	0.4006	0.4006	0	0.0274523	0	6.36039e-05	0	0
>	N2		0.811217	0.75	0.002	0.002	0	0.0316013	0	1.49055e-09	0	0
>	O2		0.188783	0.25	0.0004	0.0004	0	0	0	0	0	0
>	CL2		0	0	0	0	0	0.00030706	0	0	0	0

>	C		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
>	WATER		0	0	0	0	0	0.0436246	0	0.999933	0	0
>	S		0	0	0	0	0	0.00109682	0	0	0	0
>	CO		0	0	0	0	0	0.369604	0	2.19885e-08	0	0
>	CO2		0	0	0.4006	0.4006	0	0.0274523	0	6.36039e-05	0	0
>	N2		0.811217	0.75	0.002	0.002	0	0.0316013	0	1.49055e-09	0	0
>	O2		0.188783	0.25	0.0004	0.0004	0	0	0	0	0	0
>	CL2		0	0	0	0	0	0.00030706	0	0	0	0
>	METHANE		0	0	0.597	0.597	1	0.00757996	1	7.81613e-08	0	0
>	H2		0	0	0	0	0	0.415717	0	2.29343e-06	0	0
>	ETHANE		0	0	0	0	0	4.57265e-08	0	5.23394e-13	0	0
>	PROPANE		0	0	0	0	0	1.012e-12	0	0	0	0
>	I-BUTANE		0	0	0	0	0	1.04413e-17	0	0	0	0
>	N-BUTANE		0	0	0	0	0	2.23773e-17	0	0	0	0
>	P-H2		0	0	0	0	0	0.103016	0	7.57195e-07	0	0
>	HE		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
>	+ Mass Flows	kg/hr	100	92.1	38.51	38.51	12.978	3857.1	12.978	16.4496		
>	+ Mass Fractions											
>	Volume Flow	l/min	1628.65	1310.95	145.084	581.448	0.638749	133499	410.362	0.27937		
>	- Vapor Phase											
>	Molar Enthalpy	cal/mol	277.501	-1.93864	-36636.1	-48283.5		-14385.6		-17802.3		
>	Mass Enthalpy	cal/gm	9.64689	-0.066827	-1343.13	-1770.14		-1000.05		-1109.68		
>	Molar Entropy	cal/mol-K	1.8622	1.13745	1.30521	-9.83381		10.3305		-18.8212		
>	Mass Entropy	cal/gm-K	0.0647366	0.0392092	0.0551831	-0.360521		0.718145		-1.17319		
>	Molar Density	mol/cc	3.5575e-05	4.03626e-05	0.000162185	4.04686e-05		3.27961e-05		3.28556e-05		

▶	Mass Density	gm/cc	0.00102334	0.00117091	0.00442387	0.00110385		0.00047177	0.000527097			
▶	Enthalpy Flow	cal/sec	267.969	-1.70966	-14367.7	-18935.6		-1.04972e+06	-4000.4			
▶	Average MW		28.7658	29.0098	27.2767	27.2767		14.3849	16.0428			
▶	▶ Mole Flows	kmol/hr	3.47635	3.17479	1.41183	1.41183		262.693	0.808964			
▶	▶ Mole Fractions											
▶	▶ Mass Flows	kg/hr	100	92.1	38.51	38.51		3778.83	12.978			
▶	▶ Mass Fractions											
▶	Volume Flow	l/min	1626.65	1310.95	145.084	581.448		133498	410.362			
▶	- Liquid Phase											
▶	Molar Enthalpy	cal/mol						-20503.4	-60771		-68468.2	
▶	Mass Enthalpy	cal/gm						-1278.05	-3196.1		-3800.22	
▶	Molar Entropy	cal/mol-K						-39.3123	-369043		-39.2911	
▶	Mass Entropy	cal/gm-K						-2.45047	-1.94089		-2.18079	
▶	Molar Density	mol/cc						0.0204672	0.034505		0.0544684	
▶	Mass Density	gm/cc						0.32835	1.03636		0.981352	
▶	Enthalpy Flow	cal/sec						-4607.37	-69493.5		-17364.5	
▶	Average MW							16.0428	19.0141		18.0169	
▶	▶ Mole Flows	kmol/hr						0.808964	4.11683		0.913011	
▶	▶ Mole Fractions											
▶	▶ Mass Flows	kg/hr						12.978	78.2778		16.4496	
▶	▶ Mass Fractions											
▶	Volume Flow	l/min						0.658749	1.25885		0.27937	
▶	- CISOLID Substream											
▶	Temperature	C										
▶	Pressure	bar	1	1	16	1	30	0.813	0.813	15.65	1.01325	

▶	Molar Liquid Fraction											
▶	Molar Solid Fraction											
▶	Mass Liquid Fraction											
▶	Mass Solid Fraction											
▶	Molar Enthalpy	cal/mol										
▶	Mass Enthalpy	cal/gm										
▶	Molar Entropy	cal/mol-K										
▶	Mass Entropy	cal/gm-K										
▶	Molar Density	mol/cc										
▶	Mass Density	gm/cc										
▶	Enthalpy Flow	cal/sec										
▶	Average MW											
▶	▶ Mole Flows	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
▶	▶ Mole Fractions											
▶	▶ Mass Flows	kg/hr										
▶	▶ Mass Fractions											
▶	Volume Flow	l/min										
▶	- NC Substream											
▶	Temperature	C									700	
▶	Pressure	bar	1	1	16	1	30	0.813	0.813	15.65	1.01325	
▶	Mass Enthalpy	cal/gm									-871.817	
▶	Mass Density	gm/cc									1.33856	
▶	Enthalpy Flow	cal/sec									-1.21086e+06	
▶	▶ Mass Flows	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	5000	
▶	BIOMASS	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	5000	

▶	BIOMASS	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	5000	0
▶	ASH	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
▶	- Mass Fractions											
▶	BIOMASS		0	0	0	0	0	0	0	0	1	0
▶	ASH		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
▶	Volume Flow	l/min									62.2558	
▶	▶ Component Attributes											
▶	<add properties>											

	Units	GAS	H2	H2-CO	HYDROGEN	LTS-LIQ	LTS-VAP	METHANEV	N2	O2	PD	PC
Description												
From		B3	MEMBRANE	B2	B27	LTS-2	LTS-2	B2		O2		DB
To		B6				MOER	MEATER	REACTOR	PYRO	RED		PVI
Stream Class		MIXCINC	MIXCINC	MIXCINC		MI						
Maximum Relative Error												
Cost Flow	\$/hr											
- Total Stream												
Temperature	C	800	105	25	38	-120	-120	25	25	900		
Pressure	bar	1.01325	32	0.813	15.65	30	30	0.813	1.01325	1		
Mass Vapor Fraction		1	1	1	1	0	0	0.962128	1	1		
Mass Liquid Fraction		0	0	0	0	1	1	0.0378715	0	0		
Mass Solid Fraction		0	0	0	0	0	0	0	0	0		
Mass Enthalpy	cal/gm	-570.622	278.427	0.0530808	45.5896	-1288.8	-1288.8	-1118.81	-0.0658764	-576.596		
Mass Density	gm/cc	0.000160661	0.00202469	6.60881e-05	0.00121054	0.350835	0.350835	0.000604316	0.00114554	0.000148181		
Enthalpy Flow	cal/sec	-579671	542.702	3.29686	55.6001	-1590.83	-5219.23	-1.12519e+06	-1.8299	-617775		
- Mass Flows	kg/hr	3657.08	7.01701	223.596	4.39048	4.44367	14.5789	3620.53	100	3857.1		
BIOMASS	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
ASH	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
C	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
WATER	kg/hr	109.689	0	0	0	0	0	209.689	0	209.689		
S	kg/hr	9.38385	0	0	0	0	0	9.38385	0	9.38385		
CO	kg/hr	2799.02	0	0	0	0	0	2762.22	0	2762.22		
CO2	kg/hr	264.534	0	0	0	0	0	322.352	0	322.352		
N2	kg/hr	157.197	0	0	0	0	0	236.197	100	236.197		
O2	kg/hr	1.10794e-17	0	0	0	0	0	0	0	0		

CL2	kg/hr	5.80905	0	0	0	0	0	5.80905	0	5.80905		
METHANE	kg/hr	32.4451	0	0	0	4.44367	14.5789	19.467	0	32.4451		
H2	kg/hr	223.596	7.01701	223.596	4.39048	0	0	0	0	223.596		
ETHANE	kg/hr	0.000366858	0	0	0	0	0	0.000366858	0	0.000366858		
PROPANE	kg/hr	1.19184e-08	0	0	0	0	0	1.19184e-08	0	1.19184e-08		
I-BUTANE	kg/hr	1.61922e-13	0	0	0	0	0	0	0	1.61922e-13		
N-BUTANE	kg/hr	3.47026e-13	0	0	0	0	0	0	0	3.47026e-13		
P-H2	kg/hr	55.408	0	0	0	0	0	55.408	0	55.408		
HE	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
- Mass Fractions												
BIOMASS		0	0	0	0	0	0	0	0	0		
ASH		0	0	0	0	0	0	0	0	0		
C		0	0	0	0	0	0	0	0	0		
WATER		0.0299955	0	0	0	0	0	0.0579166	0	0.0543643		
S		0.00256594	0	0	0	0	0	0.00259184	0	0.00243287		
CO		0.76537	0	0	0	0	0	0.762934	0	0.716139		
CO2		0.0723348	0	0	0	0	0	0.0890346	0	0.0835736		
N2		0.0429842	0	0	0	0	0	0.0632382	1	0.0612368		
O2		3.02956e-21	0	0	0	0	0	0	0	0		
CL2		0.00158844	0	0	0	0	0	0.00160448	0	0.00150607		
METHANE		0.00887184	0	0	0	1	1	0.00537685	0	0.00841177		
H2		0.0611406	1	1	1	0	0	0	0	0.05797		
ETHANE		1.00314e-07	0	0	0	0	0	1.01327e-07	0	9.51123e-08		
PROPANE		3.25899e-12	0	0	0	0	0	3.29189e-12	0	3.08999e-12		
I-BUTANE		4.42763e-17	0	0	0	0	0	0	0	4.19803e-17		

N-BUTANE		9.48913e-17	0	0	0	0	0	0	0	8.99705e-17		
P-H2		0.0151509	0	0	0	0	0	0.0153038	0	0.0143652		
HE		0	0	0	0	0	0	0	0	0		
Volume Flow	l/min	379378	57.7619	56388.5	60.4482	0.2111	0.692582	75022.9	1454.92	433827		
- MIXED Substream												
Phase		Vapor Phase	Vapor Phase	Vapor Phase	Vapor Phase	Liquid Phase	Liquid Phase		Vapor Phase	Vapor Phase		Vel
Temperature	C	800	105	25	38	-120	-120	25	25	900		
Pressure	bar	1.01325	32	0.813	15.65	30	30	0.813	1.01325	1		
Molar Vapor Fraction		1	1	1	1	0	0	0.952395	1	1		
Molar Liquid Fraction		0	0	0	0	1	1	0.0476052	0	0		
Molar Solid Fraction		0	0	0	0	0	0	0	0	0		
Mass Vapor Fraction		1	1	1	1	0	0	0.962128	1	1		
Mass Liquid Fraction		0	0	0	0	1	1	0.0378715	0	0		
Mass Solid Fraction		0	0	0	0	0	0	0	0	0		
Molar Enthalpy	cal/mol	-8074.68	561.276	0.107005	91.9033	-20675.8	-20675.8	-26119.3	-1.84543	-8335.48		
Mass Enthalpy	cal/gm	-570.622	278.427	0.0530808	45.5896	-1288.8	-1288.8	-1118.81	-0.0658764	-576.596		
Molar Entropy	cal/mol-K	19.5132	-5.21797	0.436639	-5.149	-40.4021	-40.4021	13.204	-0.00532922	19.9155		
Mass Entropy	cal/gm-K	1.37896	-2.58843	0.216699	-2.55422	-2.5184	-2.5184	0.565589	-0.000190238	1.37763		
Molar Density	mol/cc	1.13336e-05	0.00100437	3.27837e-05	0.0006005	0.0218687	0.0218687	3.44525e-05	4.08923e-05	1.02502e-05		
Mass Density	gm/cc	0.000160661	0.00202469	6.60881e-05	0.00121054	0.350835	0.350835	0.000604316	0.00114554	0.000148181		
Enthalpy Flow	cal/sec	-579671	542.702	3.29686	55.6001	-1590.83	-5219.23	-1.12519e+06	-1.8299	-617775		
Average MW		14.1507	2.01588	2.01588	2.01588	16.0428	16.0428	23.3457	28.0135	14.4564		
- Mole Flows	kmol/hr	258.439	3.48087	110.918	2.17795	0.276989	0.908753	155.084	3.56971	266.81		
C	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
WATER	kmol/hr	6.08865	0	0	0	0	0	11.6395	0	11.6395		

>	S		0.00113234	0	0	0	0	0	0.00188699	0	0.00109682
>	CO		0.386659	0	0	0	0	0	0.635878	0	0.369604
>	CO2		0.0232581	0	0	0	0	0	0.0472297	0	0.0274523
>	N2		0.0217129	0	0	0	0	0	0.0543677	1	0.0316013
>	O2		1.33975e-21	0	0	0	0	0	0	0	0
>	CL2		0.000317006	0	0	0	0	0	0.000528275	0	0.00030706
>	METHANE		0.00782548	0	0	0	1	1	0.00782447	0	0.00757996
>	H2		0.429182	1	1	1	0	0	0	0	0.415717
>	ETHANE		4.72076e-08	0	0	0	0	0	7.86691e-08	0	4.57265e-08
>	PROPANE		1.04582e-12	0	0	0	0	0	1.7428e-12	0	1.013e-12
>	I-BUTANE		1.07795e-17	0	0	0	0	0	0	0	1.04413e-17
>	N-BUTANE		2.31021e-17	0	0	0	0	0	0	0	2.23773e-17
>	P-H2		0.106353	0	0	0	0	0	0.177232	0	0.103016
>	HE		0	0	0	0	0	0	0	0	0
>	+ Mass Flows	kg/hr	3657.08	7.01701	223.596	4.39048	4.44367	14.5789	3620.53	100	3857.1
>	+ Mass Fractions										
>	Volume Flow	l/min	379378	57.7619	56388.5	60.4482	0.2111	0.692582	75022.9	1454.92	433827
>	- Vapor Phase										
>	Moler Enthalpy	cal/mol	-8074.68	561.276	0.107005	91.9033			-24211.3	-1.84543	-8335.48
>	Mass Enthalpy	cal/gm	-570.622	278.427	0.0530808	45.5896			-1026.59	-0.0638764	-576.596
>	Moler Entropy	cal/mol-K	19.5132	-5.21797	0.436839	-5.149			15.7776	-0.00532922	19.9155
>	Mass Entropy	cal/gm-K	1.37896	-2.58843	0.216699	-2.55422			0.668987	-0.000190238	1.37763
>	Moler Density	mol/cc	1.13536e-05	0.00100437	3.27837e-05	0.0000005			3.26134e-05	4.06923e-05	1.02502e-05
>	Mass Density	gm/cc	0.000160661	0.00202469	6.60881e-05	0.00121054			0.000773879	0.00114554	0.000148181
>	Enthalpy Flow	cal/sec	-579671	542.702	3.29686	55.6001			-993340	-1.8299	-617775

>	Average MW		14.1507	2.01588	2.01588	2.01588			23.5843	28.0135	14.4564
>	+ Mole Flows	kmol/hr	258.439	3.48087	110.918	2.17795			147.701	3.56971	266.81
>	+ Mole Fractions										
>	+ Mass Flows	kg/hr	3657.08	7.01701	223.596	4.39048			3483.41	100	3857.1
>	+ Mass Fractions										
>	Volume Flow	l/min	379378	57.7619	56388.5	60.4482			75020.7	1454.92	433827
>	- Liquid Phase										
>	Moler Enthalpy	cal/mol					-20675.8	-20675.8	-64290.7		
>	Mass Enthalpy	cal/gm					-1288.8	-1288.8	-3461.65		
>	Moler Entropy	cal/mol-K					-40.4021	-40.4021	-38.2818		
>	Mass Entropy	cal/gm-K					-2.5184	-2.5184	-2.06124		
>	Moler Density	mol/cc					0.0218687	0.0218687	0.0548141		
>	Mass Density	gm/cc					0.350835	0.350835	1.01802		
>	Enthalpy Flow	cal/sec					-1590.83	-5219.23	-131846		
>	Average MW						16.0428	16.0428	18.5723		
>	+ Mole Flows	kmol/hr					0.276989	0.908753	7.38279		
>	+ Mole Fractions										
>	+ Mass Flows	kg/hr					4.44367	14.5789	137.115		
>	+ Mass Fractions										
>	Volume Flow	l/min					0.2111	0.692582	2.2448		
>	- CISOLID Substream										
>	Temperature	C									
>	Pressure	bar		32	0.813	15.65	30		0.813	1.01325	1
>	Moler Liquid Fraction										
>	Moler Solid Fraction										

>	Mass Liquid Fraction										
>	Mass Solid Fraction										
>	Moler Enthalpy	cal/mol									
>	Mass Enthalpy	cal/gm									
>	Moler Entropy	cal/mol-K									
>	Mass Entropy	cal/gm-K									
>	Moler Density	mol/cc									
>	Mass Density	gm/cc									
>	Enthalpy Flow	cal/sec									
>	Average MW										
>	+ Mole Flows	kmol/hr	0								
>	+ Mole Fractions										
>	+ Mass Flows	kg/hr									
>	+ Mass Fractions										
>	Volume Flow	l/min									
>	- NC Substream										
>	Temperature	C									
>	Pressure	bar		32	0.813	15.65	30		0.813	1.01325	1
>	Mass Enthalpy	cal/gm									
>	Mass Density	gm/cc									
>	Enthalpy Flow	cal/sec									
>	- Mass Flows	kg/hr	0								
>	BIOMASS	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0
>	ASH	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0
>	- Mass Fractions										

Molar Density	mol/cc																			
Mass Density	gm/cc																			
Enthalpy Flow	cal/sec																			
Average MW																				
➤ Mole Flows	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
➤ Mole Fractions																				
➤ Mass Flows	kg/hr																			
➤ Mass Fractions																				
Volume Flow	l/min																			
- NC Substream																				
Temperature	C																			
Pressure	bar			32	0.813	15.65		30				0.813	1.01325		1					
Mass Enthalpy	cal/gm																			
Mass Density	gm/cc																			
Enthalpy Flow	cal/sec																			
- Mass Flows	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
BIOMASS	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ASH	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
- Mass Fractions																				
BIOMASS		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ASH		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Volume Flow	l/min																			
➤ Component Attributes																				
<add properties>																				

Description																					
From		DECOUP	B6	RED	B16	MEMBRANE	REACTOR	REACTOR	HEATER	FLASH	B										
To		PYRO	OXI	B1	B17		FLASH			HEATER	M										
Stream Class		MIXCINC	MIXCINC	MIXCINC	MIXCINC	MIXCINC	MIXCINC	MIXCINC	MIXCINC	MIXCINC	M										
Maximum Relative Error																					
Cost Flow	\$/hr																				
- Total Stream																					
Temperature	C	800	747.666	900	908.747	105	925			304.508	105										
Pressure	bar	1.01325	1	1	16	32	32	32	32	32	32										
Mass Vapor Fraction		0.452073	1	1	1	0.999339	0			1	0										
Mass Liquid Fraction		0	0	0	0	0.000660801	1			0	1										
Mass Solid Fraction		0.547927	0	0	0	0	0			0	0										
Mass Enthalpy	cal/gm	47.8264	-637.578	-576.596	-2111.33	-1020.88	-2123.44			-3087.03	-3720.27										
Mass Density	gm/cc	0.000290781	0.000169871	0.000148181	0.00347101	0.0240707	0.293694			0.0131018	0.915349										
Enthalpy Flow	cal/sec	66425.5	-683109	-617775	-49299.6	-999567	-6.38603e+06			-6.25533e+06	-7.53848e+06										
- Mass Flows	kg/hr	5000	3857.08	3857.1	84.06	3524.85	10826.6	0	7294.77	7294.77	0										
BIOMASS	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0										
ASH	kg/hr	318.604	0	0	0	0	0	0	0	0	0										
C	kg/hr	2421.03	0	0	0	0	0	0	0	0	0										
WATER	kg/hr	531.5	209.689	209.689	45.55	111.028	7394.89	0	7283.87	7283.87	0										
S	kg/hr	9.38385	9.38385	9.38385	0	2.62e-07	9.38385	0	9.38385	9.38385	0										
CO	kg/hr	0	2799.02	2762.22	0	2794.47	2794.73	0	235503	235503	0										
CO2	kg/hr	0	264.534	322.352	24.891	321.433	322.352	0	0.919371	0.919371	0										
N2	kg/hr	57.1968	236.197	236.197	0.0791005	236.17	236.197	0	0.0272141	0.0272141	0										
O2	kg/hr	1416.51	21	0	0.0180707	0	0	0	0	0	0										

CL2	kg/hr	5.80905	5.80905	5.80905	0	5.50939	5.80905	0	0.29966	0.29966	0										
METHANE	kg/hr	0	32.4451	32.4451	13.5218	0.649701	0.650241	0	0.000539676	0.000539676	0										
H2	kg/hr	239.958	223.596	223.596	0	0	7.01797	0	0.000560466	0.000560466	0										
ETHANE	kg/hr	0	0.000366858	0.000366858	0	0.000366574	0.000366858	0	2.84563e-07	2.84563e-07	0										
PROPANE	kg/hr	0	1.19184e-08	1.19184e-08	0	1.19150e-08	1.19184e-08	0	2.64034e-12	2.64034e-12	0										
I-BUTANE	kg/hr	0	1.61922e-13	1.61922e-13	0	0	0	0	0	0	0										
N-BUTANE	kg/hr	0	3.47026e-13	3.47026e-13	0	0	0	0	0	0	0										
P-H2	kg/hr	0	55.408	55.408	0	55.3907	55.408	0	0.0173318	0.0173318	0										
HE	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0										
- Mass Fractions																					
BIOMASS		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0										
ASH		0.0637208	0	0	0	0	0	0	0	0	0										
C		0.484207	0	0	0	0	0	0	0	0	0										
WATER		0.1063	0.0543646	0.0543643	0.541875	0.0314986	0.683028	0	0.998505	0.998505	0										
S		0.00187677	0.00243289	0.00243287	0	7.43294e-11	0.000666737	0	0.00128638	0.00128638	0										
CO		0	0.723683	0.716139	0	0.792791	0.258134	0	3.50255e-05	3.50255e-05	0										
CO2		0	0.068584	0.0635736	0.29611	0.0911904	0.029774	0	0.000126031	0.000126031	0										
N2		0.0114394	0.0612371	0.0612368	0.000941	0.0670013	0.0218163	0	3.73063e-06	3.73063e-06	0										
O2		0.283303	0.00544453	0	0.000214974	0	0	0	0	0	0										
CL2		0.00116181	0.00150607	0.00150607	0	0.00156301	0.000536551	0	4.10787e-05	4.10787e-05	0										
METHANE		0	0.00641181	0.00641177	0.160859	0.00024106	7.85323e-05	0	7.39812e-08	7.39812e-08	0										
H2		0.0479917	0.0579703	0.05797	0	0	0.000648213	0	1.31665e-07	1.31665e-07	0										
ETHANE		0	9.51128e-08	9.51123e-08	0	1.03997e-07	3.38848e-08	0	3.90091e-11	3.90091e-11	0										
PROPANE		0	3.09e-12	3.08999e-12	0	3.3805e-12	1.10084e-12	0	3.6195e-16	3.6195e-16	0										
I-BUTANE		0	4.19805e-17	4.19803e-17	0	0	0	0	0	0	0										

N-BUTANE		0	8.9971e-17	8.99705e-17	0	0	0	0	0	0	0
P-H2		0	0.0143653	0.0143652	0	0.0157143	0.00511775	0	2.37592e-06	2.37592e-06	0
HE		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Volume Flow	l/min	4	376433	433827	403.629	2440.63	614.395	0	9279.64	133.085	269.854
MIXED Substream											
Phase			Vapor Phase	Vapor Phase	Vapor Phase		Liquid Phase		Vapor Phase	Liquid Phase	Vapor Phase
Temperature	C	0	747.666	900	908.747	105	925		304.508	105	25
Pressure	bar	5	1	1	16	32	32	32	32	32	0.613
Molar Vapor Fraction		1	1	1	1	0.999134	0	0	1	0	1
Molar Liquid Fraction		0	0	0	0	0.000866057	1	0	0	1	0
Molar Solid Fraction		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Mass Vapor Fraction		1	1	1	1	0.999339	0	0	1	0	1
Mass Liquid Fraction		0	0	0	0	0.000660801	1	0	0	1	0
Mass Solid Fraction		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Molar Enthalpy	cal/mol	5	-9194.4	-8335.48	-45042.6	-24106.8	-41244.2		-55650.6	-67066.2	-17802.3
Mass Enthalpy	cal/gm	5	-637.578	-576.596	-2111.33	-1020.88	-2123.44		-3087.03	-3720.27	-1109.68
Molar Entropy	cal/mol-K	2	18.8711	19.9155	-0.692809	10.0928	-5.2292		-12.3217	-35.4408	-18.8212
Mass Entropy	cal/gm-K	7	1.3086	1.37763	-0.0324748	0.427411	-0.269223		-0.683502	-1.96596	-1.17319
Molar Density	mol/cc	5	1.17795e-05	1.02502e-05	0.0001627	0.00101935	0.0151207		0.000726776	0.0506761	3.28558e-05
Mass Density	gm/cc	3	0.000169871	0.000146181	0.00347101	0.0240707	0.293694		0.0131018	0.913549	0.000527097
Enthalpy Flow	cal/sec	3	-683109	-617775	-49299.6	-999567	-6.38603e+06		-6.25533e+06	-7.53848e+06	-2630.66
Average MW		5	14.4208	14.4564	21.3337	23.6138	19.4233		18.0272	18.0272	16.0428
Mole Flows											
C	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
WATER	kmol/hr	7	11.6395	11.6395	2.52641	6.16299	410.479	0	404.316	404.316	0

		R-FU	RSL-FU	RSP-F	RLI	SU	SM	SS	SLC	SEPT-ERQ	
S	kmol/hr	2	0.292642	0.292642	0	8.17066e-09	0.292642	0	0.292642	0.292642	
CO	kmol/hr	0	99.9279	98.6142	0	99.7655	99.7746	0	0.00912173	0.00912173	
CO2	kmol/hr	0	6.0108	7.32456	0.565579	7.30396	7.32456	0	0.0208901	0.0208901	
N2	kmol/hr	6	8.43154	8.43154	0.00282366	8.43057	8.43154	0	0.000971464	0.000971464	
O2	kmol/hr	7	0.656275	0	0.000564731	0	0	0	0	0	
CL2	kmol/hr	8	0.0819268	0.0819268	0	0.0777006	0.0819268	0	0.00422619	0.00422619	
METHANE	kmol/hr	0	2.02241	2.02241	0.842892	0.0529684	0.0529684	0	3.36398e-05	3.36398e-05	
H2	kmol/hr	4	110.918	110.918	0	0	3.48134	0	0.00047645	0.00047645	
ETHANE	kmol/hr	0	1.22003e-05	1.22003e-05	0	1.21908e-05	1.22003e-05	0	9.46345e-09	9.46345e-09	
PROPANE	kmol/hr	0	2.7028e-10	2.7028e-10	0	2.7022e-10	2.7028e-10	0	5.98763e-14	5.98763e-14	
I-BUTANE	kmol/hr	0	2.78564e-15	2.78564e-15	0	0	0	0	0	0	
N-BUTANE	kmol/hr	0	5.9705e-15	5.9705e-15	0	0	0	0	0	0	
P-H2	kmol/hr	0	27.4858	27.4858	0	27.4772	27.4858	0	0.00859763	0.00859763	
HE	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
Mole Fractions											
C		0	0	0	0	0	0	0	0	0	
WATER		5	0.0435176	0.0436246	0.641689	0.0412874	0.736411	0	0.999167	0.999167	
S		3	0.00109413	0.00109682	0	5.47372e-11	0.000525008	0	0.000723192	0.000723192	
CO		0	0.373609	0.369604	0	0.668353	0.178999	0	2.25421e-05	2.25421e-05	
CO2		0	0.0224731	0.0274523	0.143339	0.048929	0.0131405	0	5.16248e-05	5.16248e-05	
N2		7	0.0315237	0.0316013	0.000716621	0.0564784	0.0151264	0	2.40073e-06	2.40073e-06	
O2		7	0.00245367	0	0.000143324	0	0	0	0	0	
CL2		2	0.000306307	0.00030706	0	0.000520535	0.000146979	0	1.0444e-05	1.0444e-05	
METHANE		0	0.00756136	0.00757996	0.213911	0.000354824	9.50807e-05	0	8.31326e-08	8.31326e-08	
H2		1	0.414697	0.415717	0	0	0.00624563	0	1.17743e-06	1.17743e-06	

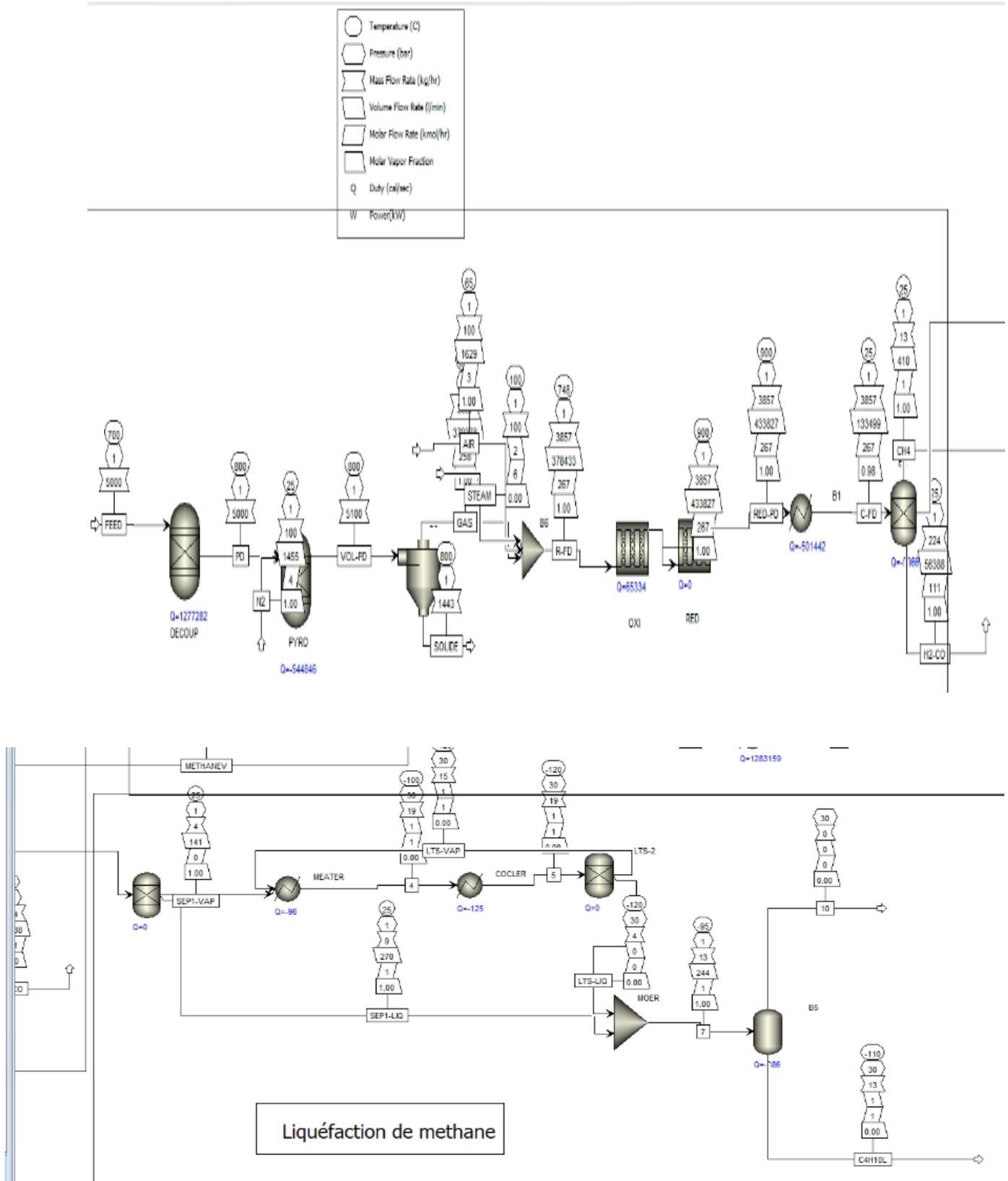
ETHANE		0	4.56143e-08	4.57265e-08	0	8.16693e-08	2.18877e-08	0	2.33866e-11	2.33866e-11	0
PROPANE		0	1.01052e-12	1.013e-12	0	1.81027e-12	4.8489e-13	0	1.4797e-16	1.4797e-16	0
I-BUTANE		0	1.04156e-17	1.04413e-17	0	0	0	0	0	0	0
N-BUTANE		0	2.25224e-17	2.25773e-17	0	0	0	0	0	0	0
P-H2		0	0.102783	0.103016	0	0.184076	0.0493103	0	2.12469e-05	2.12469e-05	0
HE		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Mass Flows	kg/hr	6	3857.08	3857.1	84.06	3524.85	10826.6		7294.77	7294.77	8.53435
Mass Fractions											
Volume Flow	l/min	5	376433	433827	403.629	2440.63	614.395		9279.64	133.085	269.854
Vapor Phase											
Molar Enthalpy	cal/mol	5	-9194.4	-8335.48	-45042.6	-24069.5			-55650.6	-67066.2	-17802.3
Mass Enthalpy	cal/gm	5	-637.578	-576.596	-2111.33	-1019.09			-3087.03	-3720.27	-1109.68
Molar Entropy	cal/mol-K	2	18.8711	19.9155	-0.692809	10.1323			-12.3217	-35.4408	-18.8212
Mass Entropy	cal/gm-K	7	1.3086	1.37763	-0.0324748	0.428996			-0.683502	-1.96596	-1.17319
Molar Density	mol/cc	5	1.17795e-05	1.02502e-05	0.0001627	0.00101648			0.000726776	0.0506761	3.28558e-05
Mass Density	gm/cc	3	0.000169871	0.000146181	0.00347101	0.0240552			0.0131018	0.913549	0.000527097
Enthalpy Flow	cal/sec	3	-683109	-617775	-49299.6	-997156			-6.25533e+06	-7.53848e+06	-2630.66
Average MW		5	14.4208	14.4564	21.3337	23.6187			18.0272	18.0272	16.0428
Mass Flows	kg/hr	1	267.466	266.81	3.94024	149.141			404.653	404.653	0.531975
Mass Fractions											
Volume Flow	l/min	5	376433	433827	403.629	2440.58			9279.64		269.854
Liquid Phase											
Molar Enthalpy	cal/mol										-67066.2

CL2	kg/hr	0	0	0	0	0	0	5.50939	5.80905	0
METHANE	kg/hr	5	4.44397	0	0	0	0	0.849701	32.4451	0
H2	kg/hr	0	0	0	0	0	0	7.01701	223.596	0
ETHANE	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0.000366374	0.000366858	0
PROPANE	kg/hr	0	0	0	0	0	0	1.19158e-08	1.19164e-08	0
I-BUTANE	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	1.61922e-13	0
N-BUTANE	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	3.47026e-13	0
P-H2	kg/hr	0	0	0	0	0	0	55.3907	55.408	0
HE	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0
- Mass Fractions										
BIOMASS		0	0	0	0	0	0	0	0	0
ASH		0	0	0.220806	0	0	0	0	0.0624714	0
C		0	0	0.779194	0	0	0	0	0.220453	0
WATER		0	0	0	1	1	1	0.031436	0.0215076	1
S		0	0	0	0	0	0	7.41817e-11	0.00183997	0
CO		0	0	0	0	0	0	0.791216	0.546828	0
CO2		0	0	0	0	0	0	0.0910093	0.0518695	0
N2		0	0	0	0	0	0	0.0666681	0.0308229	0
O2		0	0	0	0	0	0	0	2.17242e-21	0
CL2		0	0	0	0	0	0	0.00155991	0.00113903	0
METHANE		1	1	0	0	0	0	0.000240581	0.00636177	0
H2		0	0	0	0	0	0	0.00196677	0.0438424	0
ETHANE		0	0	0	0	0	0	1.0379e-07	7.1933e-08	0
PROPANE		0	0	0	0	0	0	3.37378e-12	2.33694e-12	0
I-BUTANE		0	0	0	0	0	0	0	3.17495e-17	0

N-BUTANE		0	0	0	0	0	0	0	6.80442e-17	0
P-H2		0	0	0	0	0	0	0.0156631	0.0108643	0
HE		0	0	0	0	0	0	0	0	0
Volume Flow	l/min	4	140.508	9.85103	7728.89	1.81496	258.447	2501.17	379388	0.763782
- MIXED Substream										
Phase				Vapor Phase	Vapor Phase	Liquid Phase	Vapor Phase	Vapor Phase	Vapor Phase	Liquid Phase
Temperature	C	5	25		237.196	100	909	105	800	25
Pressure	bar	3	0.813		32	1.01325	16	32	1.01325	1
Molar Vapor Fraction		1	1		1	0	1	1	1	0
Molar Liquid Fraction		0	0		0	1	0	0	0	1
Molar Solid Fraction		0	0		0	0	0	0	0	0
Mass Vapor Fraction		1	1		1	0	1	1	1	0
Mass Liquid Fraction		0	0		0	1	0	0	0	1
Mass Solid Fraction		0	0		0	0	0	0	0	0
Molar Enthalpy	cal/mol	3	-17802.3		-56394.7	-67239	-49736.7	-23535.7	-8074.68	-68725.9
Mass Enthalpy	cal/gm	8	-1109.68		-3130.38	-3733.44	-2760.81	-1017.91	-570.622	-3814.86
Molar Entropy	cal/mol-K	2	-18.8212		-13.5722	-35.7327	-3.93785	9.98283	19.5132	-40.1199
Mass Entropy	cal/gm-K	9	-1.17319		-0.753374	-1.98347	-0.218584	0.431752	1.37896	-2.22699
Molar Density	mol/cc	5	3.28558e-05		0.000862564	0.0509729	0.000163052	0.00101787	1.13536e-05	0.055173
Mass Density	gm/cc	7	0.000527097		0.0155393	0.918292	0.00293742	0.0235348	0.000160661	0.993957
Enthalpy Flow	cal/sec	6	-1369.74		-6.26607e+06	-103707	-34931.9	-998642	-579671	-48268.6
Average MW		8	16.0428		18.0153	18.0153	18.0153	23.1217	14.1507	18.0153
- Mole Flows										
C	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0
WATER	kmol/hr	0	0	0	400	5.55084	2.52841	6.16299	6.08865	2.52841

▶	S	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	8.17066e-09	0.292642	0
▶	CO	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	99.7655	99.9279	0
▶	CO2	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	7.30366	6.0108	0
▶	N2	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	8.43057	5.61147	0
▶	O2	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0	3.46243e-19	0
▶	CL2	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0.0777006	0.0819268	0
▶	METHANE	kmol/hr	5	0.276989	0	0	0	0	0.0529648	2.02241	0
▶	H2	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	3.48087	110.918	0
▶	ETHANE	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	1.21908e-05	1.22003e-05	0
▶	PROPANE	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	2.70222e-10	2.70226e-10	0
▶	I-BUTANE	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0	2.78584e-15	0
▶	N-BUTANE	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0	5.9705e-15	0
▶	P-H2	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	27.4772	27.4858	0
▶	HE	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0
▶	- Mole Fractions										
▶	C		0	0	0	0	0	0	0	0	0
▶	WATER		0	0	0	1	1	1	0.0403465	0.0235393	1
▶	S		0	0	0	0	0	0	5.34899e-11	0.00113234	0
▶	CO		0	0	0	0	0	0	0.653123	0.386659	0
▶	CO2		0	0	0	0	0	0	0.047814	0.0232581	0
▶	N2		0	0	0	0	0	0	0.0551914	0.0217129	0
▶	O2		0	0	0	0	0	0	0	1.33975e-21	0
▶	CL2		0	0	0	0	0	0	0.000508673	0.000317006	0
▶	METHANE		1	1	0	0	0	0	0.000346738	0.00782548	0
▶	H2		0	0	0	0	0	0	0.0227678	0.429182	0

▶	ETHANE		0	0	0	0	0	0	7.98082e-08	4.72076e-08	0
▶	PROPANE		0	0	0	0	0	0	1.76902e-12	1.04582e-12	0
▶	I-BUTANE		0	0	0	0	0	0	0	1.07795e-17	0
▶	N-BUTANE		0	0	0	0	0	0	0	2.31021e-17	0
▶	P-H2		0	0	0	0	0	0	0.179882	0.106353	0
▶	HE		0	0	0	0	0	0	0	0	0
▶	+ Mass Flows	kg/hr	5	4.44367	7206.11	100	45.55	3531.87	3657.08	45.55	
▶	+ Mass Fractions										
▶	Volume Flow	l/min	4	140.508	7728.89	1.81496	258.447	2501.17	379378	0.763782	
▶	- Vapor Phase										
▶	Molar Enthalpy	cal/mol	3	-17802.3	-56394.7		-49736.7	-23535.7	-8074.68		
▶	Mass Enthalpy	cal/gm	8	-1109.68	-3130.38		-2760.81	-1017.91	-570.622		
▶	Molar Entropy	cal/mol-K	2	-18.8212	-13.5722		-3.93785	9.98283	19.5132		
▶	Mass Entropy	cal/gm-K	9	-1.17319	-0.753374		-0.218584	0.431752	1.37896		
▶	Molar Density	mol/cc	5	3.26558e-05	0.000862564		0.000163052	0.00101787	1.13536e-05		
▶	Mass Density	gm/cc	7	0.000527097	0.0155393		0.00293742	0.0235348	0.000160661		
▶	Enthalpy Flow	cal/sec	6	-1369.74	-6.26607e+06		-34931.9	-998642	-579671		
▶	Average MW		8	16.0428	18.0153		18.0153	23.1217	14.1507		
▶	+ Mole Flows	kmol/hr	5	0.276989	400		2.52841	152.751	258.439		
▶	+ Mole Fractions										
▶	+ Mass Flows	kg/hr	5	4.44367	7206.11		45.55	3531.87	3657.08		
▶	+ Mass Fractions										
▶	Volume Flow	l/min	4	140.508	7728.89		258.447	2501.17	379378		
▶	- Liquid Phase										
▶	Molar Enthalpy	cal/mol					-67259				-68725.9



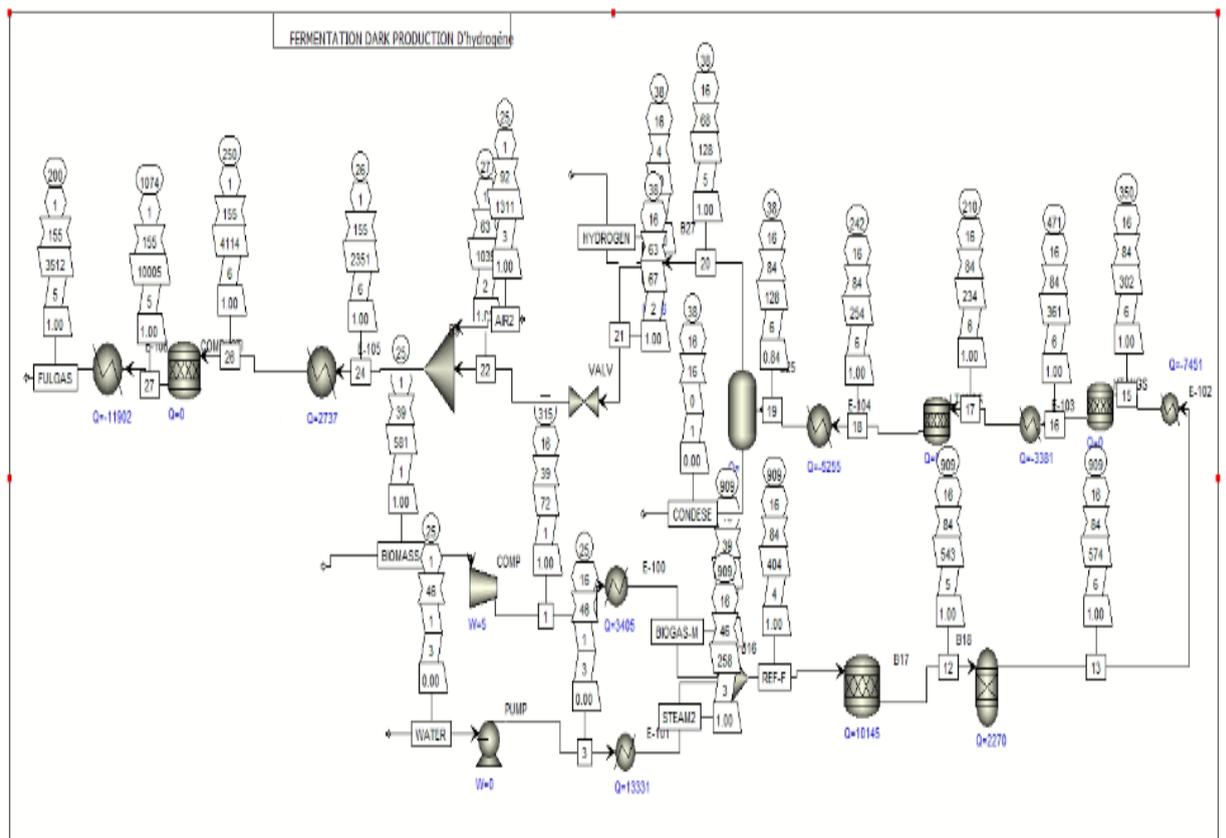
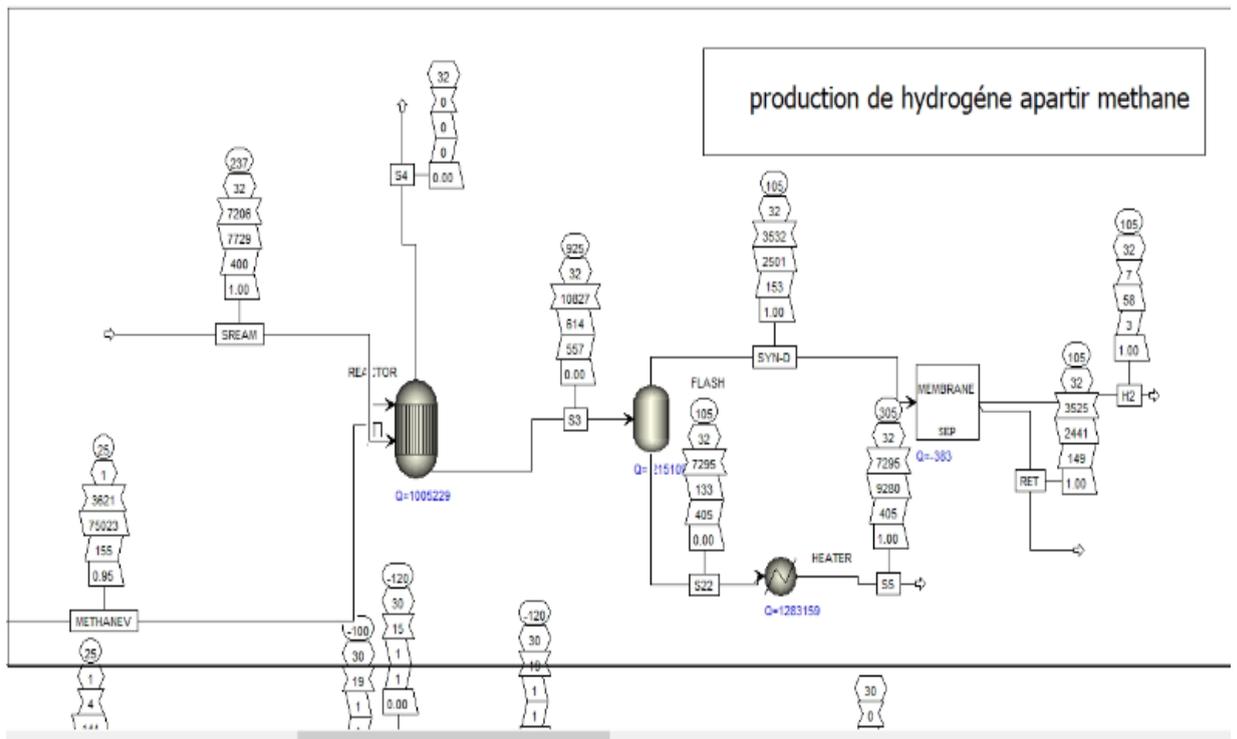


Figure (IV.59) : Résultats.

IV.2.1. Analyse et comparaison des différentes étapes de production :

IV.2.1.1. Production du méthane à partir de la biomasse :

- Quantité produite : 32,445 kg/h
- Détails : 19,467 kg/h utilisés pour le reformage en hydrogène, 12,978 kg/h pour la liquéfaction.
- Remarques : Le processus de gazéification est bien établi, capable de valoriser efficacement la biomasse.
- Rendement et efficacité : Rendement élevé, car la conversion de la biomasse en méthane est une technologie mature et bien optimisée.
- Impact environnemental :
 - Positif, car utilise une source renouvelable (biomasse).
 - Réduction des émissions de gaz à effet de serre comparée aux énergies fossiles.
- Applicabilité : Technique largement appliquée industriellement, notamment dans la production de biogaz.

IV.2.1.2. Liquéfaction du méthane :

- Quantité traitée : 12,978 kg/h (entrée), 12,978 kg/h (sortie) → Liquéfaction complète sans perte
- Rendement et efficacité : Efficacité de 100 % pour la liquéfaction, processus énergivore mais maîtrisé.
- Impact environnemental :
 - Consommation énergétique élevée due au refroidissement intensif.
 - Nécessité d'énergies renouvelables pour minimiser l'empreinte carbone.
- Applicabilité : Technologie industrielle standard pour le transport et stockage de gaz.

IV.2.1.3. Production d'hydrogène à partir du méthane :

- Quantité de méthane utilisée : 19,467 kg/h

- Quantité d'hydrogène produite : 7,017014 kg/h
- Rendement : $\approx 36,8$ % (hydrogène/méthane)
- Efficacité : Processus bien maîtrisé (reformage à la vapeur), mais avec pertes énergétiques liées aux réactions chimiques et à la purification.
- Impact environnemental :
 - Émissions de CO₂ significatives à moins d'utiliser un système de capture carbone.
 - Meilleur que les combustibles fossiles classiques mais impact non nul.
- Applicabilité : Très répandue industriellement, base de la production mondiale d'hydrogène.

IV.2.1.4. Production directe d'hydrogène à partir de la biomasse:

- Quantité d'hydrogène produite : 4,39048 kg/h
- Rendement : Plus faible que la production via méthane (car biomasse moins concentrée en énergie directe).
- Efficacité : Technologie encore en développement.
- Impact environnemental : Très favorable car faible émission directe, renouvelable.
- Applicabilité : En phase pilote, besoin d'améliorations pour monter en échelle industrielle.

IV.2.2. Résumé des données (en kg/h) et Comparaison selon des critères clés:

Tableau (IV. 25) : Résumé des donnée

Voie de conversion	Entrée Sortie		Rendement (%)
	(kg/h)	(kg/h)	
Gazéification de la biomasse → CH ₄	100	32,445	100%
Liquéfaction du méthane (CH ₄ → CH ₄ liquide)	12.978	12 ,978	100%
Reformage du méthane (CH ₄ → H ₂)	19,467	7,017014	36,8%
Fermentation sombre (biomasse → H ₂)	100	4,39048	<10%

La fermentation sombre a une faible efficacité, car la production reste limitée par des facteurs biologiques.

Tableau (IV. 26) : comparatif des différentes voies étudiées

Critère	Méthane (biomasse)	Liquéfaction du CH ₄	Reformage du CH ₄	Fermentation sombre
Quantité produite	Très élevée (32 kg/h)	Élevée (12 kg/h)	Moyenne (7 kg/h)	Faible (4 kg/h)
Rendement / efficacité	Très élevé (~100%)	Très élevé (~100%)	Moyen (36,8%)	Faible
Impact environnemental	Faible (source bio), Positif, renouvelable	Moyen (énergie élevée), Énergivore	Moyen à élevé (CO ₂)	Très faible (écologique), Très favorable, renouvelable
Faisabilité industrielle	Très bonne, Large	Bonne, Large	Excellente, Large	Faible à moyenne, Limitée à pilotes
Complexité technologique	Mature	Mature	Mature	En développement

- La meilleure efficacité est obtenue pour la production et liquéfaction du méthane à partir de la biomasse, avec un rendement de 100% pour les deux étapes, démontrant leur viabilité industrielle et énergétique.
- Le reformage du méthane reste une voie efficace pour produire de l'hydrogène, mais avec un rendement modéré et un impact CO_2 à gérer.
- La fermentation sombre est écologiquement la plus propre, mais techniquement la moins performante actuellement.

Donc, La chaîne complète "biomasse \rightarrow CH_4 \rightarrow CH_4 liquide" représente la voie la plus rentable et efficace, combinant haute production, faisabilité et rendement.



Figure (IV.60) : comparaison des quantités produites par voie (Kg /h).

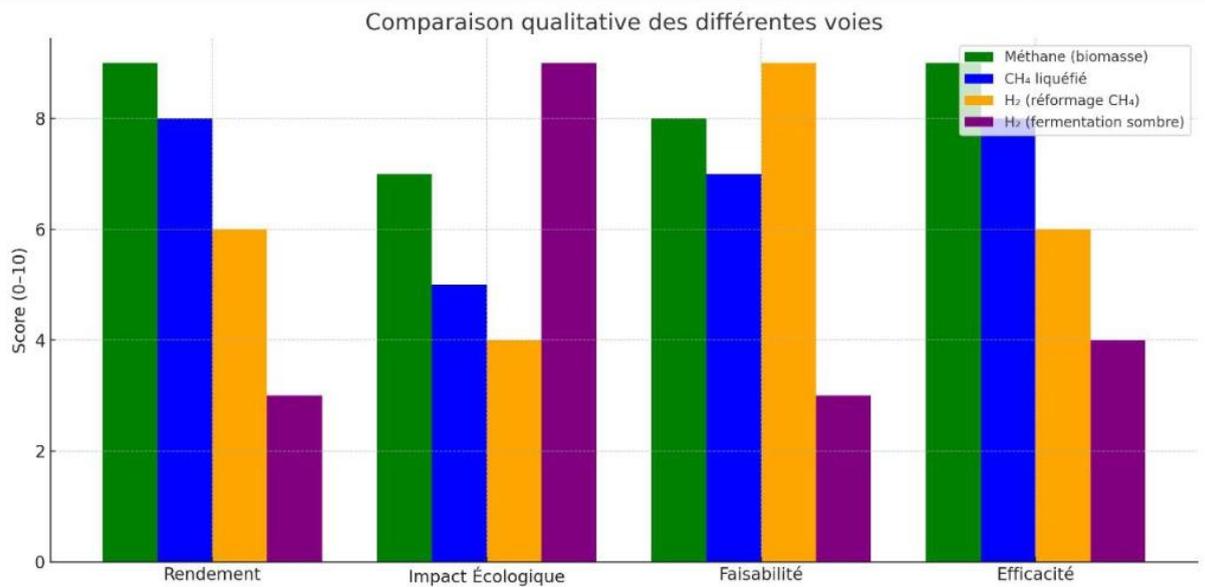


Figure (IV.61) : Comparaison qualitative des différentes voies.

IV.2.3. Perspectives de recherche et améliorations possibles de la fermentation sombre pour la production d'hydrogène :

*Optimisation microbiologique :

- Sélection ou ingénierie de souches bactériennes (ex. *Clostridium*, *Enterobacter*) plus efficaces et tolérantes.
- Objectif : améliorer le rendement molaire d'hydrogène.
- Fermentation en deux étapes : fermentation sombre + photo-fermentation :
- Utilisation des acides organiques résiduels par des bactéries photosynthétiques pour produire plus d'H₂ .
- Prétraitement de la biomasse :
- Application de traitements (enzymatiques, chimiques ou thermiques) pour convertir la lignocellulose en sucres fermentescibles.
- Utilisation de substrats mixtes :

- Mélange de différents déchets (alimentaires, agricoles, fumiers) pour un apport nutritionnel équilibré.
- Automatisation du contrôle des paramètres opératoires :
 - Régulation en temps réel (pH, température, charge organique) grâce à l'intelligence artificielle et aux capteurs.
- Intégration énergétique du procédé :
 - Récupération et réutilisation de la chaleur produite à différentes étapes pour diminuer la consommation énergétique globale.
- Valorisation des gaz secondaires :
 - Récupération et utilisation du CO ou du méthane résiduel (CH_4) via des procédés complémentaires (reformage, combustion ou cogénération).

IV.2.4. Observations générales :

- La voie thermique (via le méthane) permet une production rapide et pure, mais au coût énergétique élevé et avec un impact environnemental plus important.
- La voie biologique (fermentation sombre) est plus durable et écologique, mais nécessite un temps de réaction plus long et une optimisation microbiologique.

IV.4. Conclusion :

La production du méthane à partir de la biomasse offre la meilleure quantité et un rendement élevé, avec un impact environnemental positif grâce à l'utilisation de ressources renouvelables. La liquéfaction du méthane est parfaitement maîtrisée, garantissant un transport et stockage efficaces, mais reste énergivore.

La production d'hydrogène à partir du méthane présente un bon compromis entre rendement et applicabilité industrielle, bien qu'elle génère des émissions de CO_2 .

La production directe d'hydrogène à partir de la biomasse est encore limitée en quantité et efficacité, mais offre un potentiel environnemental important pour l'avenir.

La liquéfaction de l'hydrogène reste technologiquement complexe et coûteuse, avec une faisabilité industrielle réduite en raison des exigences cryogéniques extrêmes et du manque de fluides réfrigérants adaptés.

Conclusion Générale

V. Conclusion générale :

Ce travail de recherche a exploré, à travers une démarche de simulation sous Aspen Plus, plusieurs voies de valorisation énergétique de la biomasse, en mettant l'accent sur la production de deux vecteurs essentiels de la transition énergétique : le méthane (CH_4) et l'hydrogène (H_2). L'étude s'est structurée autour de trois étapes principales : la production de méthane par gazéification de la biomasse, sa liquéfaction partielle, puis sa conversion en hydrogène, parallèlement à l'étude d'une voie biologique directe par fermentation sombre.

Les résultats obtenus ont permis de dégager plusieurs enseignements importants. La gazéification de la biomasse s'est révélée être une méthode performante pour la production de méthane, atteignant un débit de 32,445 kg/h. Cette filière présente un rendement énergétique intéressant, un impact environnemental modéré et une faisabilité technique confirmée à l'échelle industrielle. La liquéfaction du méthane, bien que techniquement faisable et énergétiquement efficace, requiert des conditions opératoires extrêmes (basses températures et hautes pressions), ce qui soulève des interrogations quant à sa rentabilité économique.

La conversion du méthane liquéfié en hydrogène représente une voie indirecte prometteuse, qui offre un bon compromis entre efficacité énergétique et applicabilité industrielle. En parallèle, la fermentation sombre, en tant que procédé biologique de production directe d'hydrogène à partir de la biomasse, présente actuellement un rendement limité. Néanmoins, cette technologie émergente possède un potentiel de développement important, notamment en matière de durabilité environnementale, ce qui justifie des recherches approfondies à long terme.

Enfin, la liquéfaction de l'hydrogène, essentielle pour son stockage et son transport sur de longues distances, demeure une opération particulièrement complexe sur le plan technique. Les simulations effectuées n'ont pas permis d'atteindre les températures cryogéniques nécessaires (20 K), en raison des limitations du logiciel (absence de fluides cryogéniques adéquats dans Aspen Plus) et des exigences industrielles très contraignantes, ce qui remet en question la faisabilité immédiate de cette option.

Dans l'ensemble, l'analyse qualitative des différentes voies étudiées met en évidence que la production d'hydrogène via le méthane se positionne actuellement comme la solution la plus équilibrée et la plus industrialisable. Ce mémoire souligne ainsi la pertinence d'une approche

intégrée combinant des technologies thermo-chimiques matures avec des voies biologiques en développement. Une telle synergie pourrait, à moyen et long terme, contribuer à une transition énergétique plus durable, tout en valorisant de manière efficace les ressources locales en biomasse.

Références bibliographiques :

- [1] International Energy Agency (IEA). (2023). Global Hydrogen Review 2023.
- [2] International Renewable Energy Agency (IRENA). (2020). Green Hydrogen: A Guide to Policy Making.
- [3] IEA Bioenergy. (2021). Hydrogen from Biomass: Production and Use.
- [4] Azzaro-Pantel, C. (2013). Optimisation des procédés chimiques durables. Editions Technip.
- [5] Züttel, A. (2003). Hydrogen storage methods. *Naturwissenschaften* *Naturwissenschaften*, 91, 157–172. <https://doi.org/10.1007/s00114-003-0419-0>
- [6] Edwards, P. P., Kuznetsov, V. L., & David, W. I. F. (2008). Hydrogen energy. *Philosophical Transactions of the Royal Society A*, 366(1872), 3957–3978. <https://doi.org/10.1098/rsta.2008.0136>
- [7] Dutta, S. (2014). A review on production, storage of hydrogen and its application as fuel. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 38, 426–438. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2014.05.047>
- [8] Crabtree, G. W., Dresselhaus, M. S., & Buchanan, M. V. (2004). The Hydrogen Economy. *Physics Today*, 57(12), 39–44. <https://doi.org/10.1063/1.1842601>
- [9] Turner, J. A. (2004). A Realizable Renewable Energy Future. *Science*, 305(5686), 972–974. <https://doi.org/10.1126/science.1101192>
- [10] Momirlan, M., & Veziroglu, T. N. (2005). The properties of hydrogen as fuel tomorrow. *International Journal of Hydrogen Energy*, 30(7), 795–802. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2004.10.003>
- [11] Staffell, I., et al. (2019). The role of hydrogen and fuel cells in the global energy system. *Energy & Environmental Science*, 12(2), 463–491. <https://doi.org/10.1039/C8EE01157E>

- [12] Wang, M., Wang, C., & Gong, J. (2019). Hydrogen production from renewable resources. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 132, 110078. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2020.110078>
- [13] Towler, G., & Sinnott, R. (2012). *Chemical Engineering Design* (1re & 2e éd.). Elsevier.
- [14] Vasant, P., et al. (2015). Simulation and modelling of renewable energy systems. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 52, 1559–1572.
- [16] Seborg, D. E., Edgar, T. F., & Mellichamp, D. A. (2010). *Process Dynamics and Control*. Wiley.
- [17] COMSOL. (2023). *COMSOL Multiphysics Reference Manual*.
- [18] Bastidas-Oyanedel, J. R., & Schmidt, J. E. (2019). *Biogas Process for Sustainable Energy*. Springer.
- [19] Gani, R., & Nielsen, B. (2017). *Sustainable Process Systems Engineering*. *Academic Press*.
- [20] Nielsen, J., & Villadsen, J. (2011). *Bio reaction Engineering Principles*. Springer.
- [21] McKendry, P. (2002). Energy production from biomass (part 1). *Bio resource Technology*, 83(1), 37–46. [https://doi.org/10.1016/S0960-8524\(01\)00118-3](https://doi.org/10.1016/S0960-8524(01)00118-3)
- [22] Basu, P. (2010). *Biomass Gasification and Pyrolysis: Practical Design and Theory*. Academic Press.
- [23] Kumar, A., Jones, D. D., & Hanna, M. A. (2009). Thermochemical biomass gasification. *Energies*, 2(3), 556–581. <https://doi.org/10.3390/en20300556>
- [24] Rostrup-Nielsen, J. R., & Christiansen, L. J. (2011). *Hydrogen and Synthesis Gas by Steam- and CO₂ Reforming*. Imperial College Press.
- [25] Armor, J. N. (1999). Catalysis in the production of hydrogen. *Applied Catalysis A: General*, 176(2), 159–176. [https://doi.org/10.1016/S0926-860X\(98\)00260-3](https://doi.org/10.1016/S0926-860X(98)00260-3)

- [26] Rostrup-Nielsen, J. R. (2000). Catalytic steam reforming, in *Catalysis: Science and Technology*. Springer. https://doi.org/10.1007/978-3-662-10389-5_4
- [27] Chen, W.-H., & Chen, R. (2020). Natural gas liquefaction technologies. *Energy Conversion and Management*, 221, 113108. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2020.113108>
- [28] Kalamaras, C. M., & Efstathiou, A. M. (2013). Hydrogen production technologies. *Chemical Engineering Journal*, 285, 217–230. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2015.07.071>
- [29] Venkatarathnam, G. (2008). *Cryogenic Mixed Refrigerant Processes*. Springer. <https://doi.org/10.1007/978-3-540-74291-7>
- [30] Smith, R. (2016). *Chemical Process: Design and Integration* (2e éd.). Wiley.
- [31] Das, D., et al. (2020). Various articles on biohydrogen production.
- [32] Kapdan, I. K., & Kargi, F. (2006). *Enzyme and Microbial Technology*.
- [34] Das, D., & Veziroglu, T. N. (2001). Hydrogen production by biological processes. *International Journal of Hydrogen Energy*, 26(1), 13–28. [https://doi.org/10.1016/S0360-3199\(00\)00058-2](https://doi.org/10.1016/S0360-3199(00)00058-2)
- [35] Guo, L., et al. (2010). Factors affecting dark fermentation. *Renewable Energy*.
- [36] Ahluwalia, R. K., et al. (2023). Hydrogen liquefaction: fundamentals. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 168, 113017. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2023.113017>
- [37] Cardella, U., et al. (2017). Cryogenic hydrogen storage. *International Journal of Hydrogen Energy*, 42(2), 1228–1238. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.07.235>
- [38] Amos, W. A. (1998). Costs of storing and transporting hydrogen. NREL. <https://www.nrel.gov/docs/fy98osti/25106.pdf>
- [39] van der Burgt, M. J. (2005). *Hydrogen: Fuel for the Future*. CRC Press.
- [40] Luyben, W. L. (2002). *Process Modeling, Simulation, and Control for Chemical Engineers*. McGraw-Hill.

- [41] Marquardt, W. (2002). *Modeling and Simulation in Chemical Engineering*. Springer.
- [42] Aspen Technology Inc. (2023). Aspen Plus – Process Simulation Software. <https://www.aspentech.com>
- [43] Stephanopoulos, G. (1984). *Chemical Process Control: An Introduction to Theory and Practice*. Prentice Hall.
- [44] Seider, W. D., Seader, J. D., & Lewin, D. R. (2010). *Product and Process Design Principles: Synthesis, Analysis and Evaluation*. Wiley.
- [45] Université 8 Mai 1945 Guelma. (2024). Mémoire PFE – Simulation d'un réacteur CSTR pour la production de l'anhydride acétique.
- [46] Kister, H. Z. (1992). *Distillation Design*. McGraw-Hill.
- [47] Seader, J. D., Henley, E. J., & Roper, D. K. (2011). *Separation Process Principles* (3e éd.). Wiley.
- [48] Hewitt, G. F. (2000). *Heat Exchanger Design Handbook*. Begell House.
- [49] Turton, R., et al. (2012). *Analysis, Synthesis and Design of Chemical Processes* (4e éd.). Prentice Hall.
- [50] Luyben, W. L. (2010). *Chemical Reactor Design and Control*. Wiley.
- [51] Coulson, J. M., & Richardson, J. F. (2005). *Chemical Engineering: Vol. 1–6*. Butterworth-Heinemann.
- [52] Kern, D. Q. (1950). *Process Heat Transfer*. McGraw-Hill.
- [53] Higman, C., & van der Burgt, M. (2011). *Gasification*. Elsevier.
- [54] Fogler, H. S. (2016). *Elements of Chemical Reaction Engineering* (5e éd.). Pearson.
- [55] Levenspiel, O. (1999). *Chemical Reaction Engineering* (3e éd.). Wiley.
- [56] Douglas, J. M. (1988). *Conceptual Design of Chemical Processes*. McGraw-Hill.

[57] Rojas, M. (2020). Chemical Process Design and Simulation. Academia.edu.

[58]. H.C. Lim & C.G. Lee, Bioprocess Engineering, Prentice Hall, 2010.

[59]. S. Farid, "Simulation Tools in Bioprocessing," Biotechnol. J., 2020.

[60]. J. Monod, "La technique de culture continue," Ann. Inst. Pasteur, 1950.