



PUBLICATION PRESSE

Utilisation du logiciel BatchReactor pour une étude de sécurité dans le cadre de réactions exothermiques

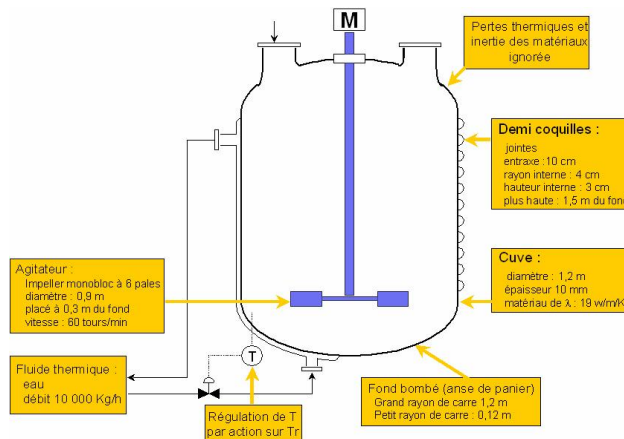
La simulation des procédés est une technique bien rodée à laquelle ont désormais fréquemment recours les professionnels des différents domaines de l'industrie des procédés. Elle permet en effet de faire face à des enjeux importants tels que la réduction des risques, l'amélioration de la compréhension des phénomènes physiques, la pérennisation des connaissances, la diminution des coûts grâce à l'optimisation des performances ou encore la réduction des temps de mise sur le marché de nouveaux produits. Pour qu'un simulateur soit efficace dans tous ces domaines, il convient qu'il utilise des modèles de connaissance (ou phénoménologiques) construits sur la base des lois fondamentales de la physique et de la chimie : les équations de conservation (masse, énergie, quantité de mouvement), la thermodynamique (équilibres chimiques et entre phases), la cinétique, ... Ces simulateurs ont l'avantage incontestable de proposer une réelle capacité de prédiction, dans un domaine de validité beaucoup plus étendu que celui pour lequel des données expérimentales sont disponibles. En revanche, ils nécessitent la mise en œuvre de méthodes numériques complexes, notamment lorsque l'aspect dynamique des procédés est abordé.

BatchReactor est un des produits de la gamme de logiciels ProSim dédié à la simulation des réacteurs chimiques discontinus développé en partenariat avec l'INPT-ENSIACET et validé par une utilisation de plus d'une dizaine d'années dans le domaine des industries chimique et pharmaceutique. Ce logiciel possède un module d'identification des cinétiques à partir de valeurs expérimentales (évolution des concentrations au cours du temps, données calorimétriques, isothermes ou non, avec ou sans coulée de réactifs). A partir de la connaissance de la chimie (espèces présentes, stoechiométrie des réactions, cinétiques des réactions), de la géométrie du réacteur et des conditions opératoires (chauffage / refroidissement, durée des étapes, alimentations, ...), BatchReactor permet, par des calculs de bilans (matière, énergie) et d'équilibres entre phases et chimiques, d'obtenir l'évolution dans le temps des différents paramètres opératoires de l'installation. Une grande diversité de dispositifs de chauffage / refroidissement et de systèmes de condensation (avec ou sans décanteur) peut être modélisée.

Un exemple d'application de ce logiciel est la synthèse du mono alkyl ester à partir d'anhydride maléique et de 1-hexanol. La réaction est exothermique et contrôlée par une loi de type Arrhenius dont les paramètres cinétiques identifiés par le logiciel à partir de données expérimentales sont résumés dans le tableau ci-après :

Facteur pré exponentiel	$4.92 \cdot 10^{15}$	l/mol h
Energie d'activation	105	kJ/mol
Enthalpie de réaction	33 500	Cal/mol

Les caractéristiques du réacteur industriel et les sont présentées sur la figure ci-après :

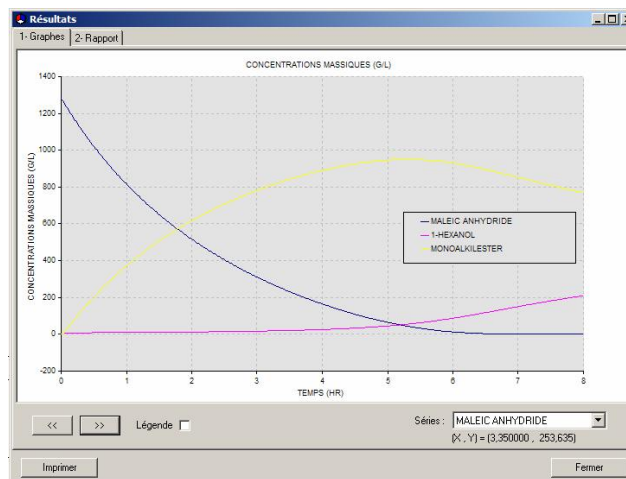


BR_03.jpg

Charge initiale du réacteur	500 kg d'anhydride maléique
Alimentation	100 kg/h de 1-hexanol pur, à une température de 95°C
Pression	1 atm
température du milieu réactionnel	Régulée à 85°C par le fluide de refroidissement

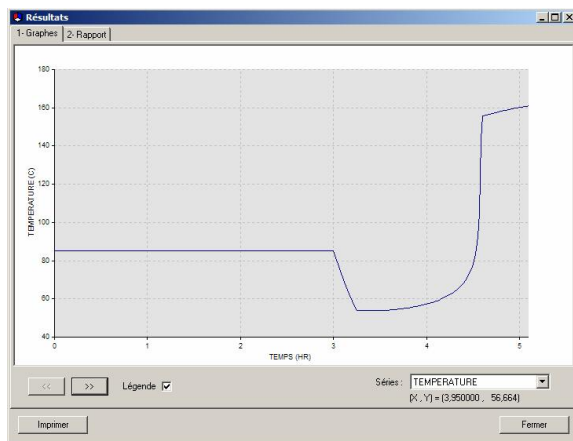
Les événements d'arrêt de la synthèse choisis par l'utilisateur sont la durée totale de la synthèse de 8h ou la quantité d'anhydride maléique restant dans le réacteur inférieure à 10 kg

Les résultats obtenus par le logiciel en termes d'évolution des concentrations du milieu réactionnel et des paramètres du système de refroidissement sont présentés ci-après :

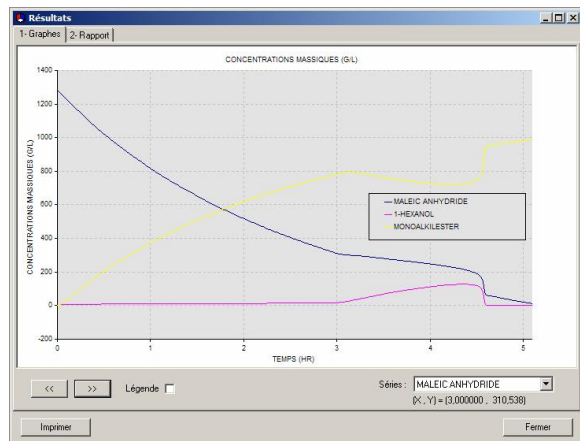


BR_05.jpg

La synthèse se déroule en un peu plus de 6 heures, le premier événement atteint étant la quantité consommée de réactif. A partir de ce point nominal, plusieurs scénarii peuvent être étudiés. Nous présenterons celui d'une perte de la régulation thermique après trois heures de fonctionnement suivi d'une perte de l'agitation après un quart d'heure.



BR_08.jpg



BR_09.jpg

La température n'étant plus régulée, le débit de fluide caloporteur à 20°C est tel que la température dans le réacteur chute, ce qui dégrade la production de mono alkyl ester. Si la synthèse était poursuivie sans autre évènement pendant huit heures, le taux de conversion de l'anhydride maléique ne serait que de 57,8 %.

La panne du système d'agitation conduit à passer d'un régime convectif forcé à un régime de convection naturelle. Les coefficients d'échange étant ainsi fortement dégradés, l'énergie dégagée par la réaction n'est plus évacuée et il y a un emballement de la température du milieu réactionnel qui ne s'arrête qu'une fois l'anhydride maléique consommé, soit après un peu plus de 5 heures de synthèse.

La simulation dynamique de réacteurs batch permet ainsi une analyse approfondie du procédé et une mise en place de procédures de sécurité des synthèses, aussi bien pendant les phases de conception que celles de revamping. Mais d'autres applications fréquentes du logiciel peuvent être citées, telles que la possibilité d'utiliser un appareil existant pour une nouvelle synthèse, l'optimisation des performances d'un réacteur, le scale-up d'un procédé ou encore la réduction des émissions de COV.

Auteur et contributeurs

ProSim S.A. : Olivier BAUDOUIN, Philippe BAUDET, Stéphane DECHELOTTE, Gilles HAMEURY.



A propos de ProSim

ProSim développe des logiciels de simulation et d'optimisation qui permettent aux industries de procédés d'accroître leur rentabilité et leur efficacité. Les solutions de ProSim s'adressent à l'industrie chimique, aux domaines du raffinage, du traitement de gaz, de la pétrochimie, de la chimie de spécialités ou encore aux industries alimentaires et pharmaceutiques, ainsi qu'aux acteurs du domaine de l'énergie. Les activités de ProSim couvrent également le conseil en ingénierie des procédés et le développement de solutions à façon. Pour plus d'informations, nous vous invitons à consulter le site web : <http://www.prosim.net>.

Contact : Gilles HAMEURY

ProSim SA

Stratège Bâtiment A

BP 2738

F-31312 LABEGE Cedex

FRANCE

Tél.: +33 (0)5 62 88 24 30

Fax: +33 (0)5 62 88 24 39

[e-mail : info@prosim.net](mailto:info@prosim.net)