

EXEMPLE D'APPLICATION BATCHREACTOR

REACTEUR MONOPHASIQUE AVEC SYSTEME DE CHAUFFE – ANALYSE DE RISQUE

OBJECTIFS DE CET EXEMPLE

Cet exemple présente la modélisation d'un réacteur monophasique liquide pour lequel le système de chauffe est décrit. Un autre intérêt est de placer deux événements d'arrêt pour une même étape. Cet exemple permet également de simuler un cas de panne sur le réacteur.

DIFFUSION	<input checked="" type="checkbox"/> Libre Internet	<input type="checkbox"/> Réservée aux clients ProSim	<input type="checkbox"/> Réduite	<input type="checkbox"/> Confidentielle
-----------	--	--	----------------------------------	---

FICHIERS BATCHREACTOR CORRESPONDANTS	BATCHREA_E07_FR - Réacteur monophasique.pbpr BATCHREA_E07_FR - Réacteur monophasique - Panne.pbpr
--------------------------------------	--

Il est rappelé au lecteur que ce cas d'utilisation est un exemple et ne doit pas être utilisé à d'autres fins. Bien que cet exemple soit basé sur un cas concret, il ne doit pas être considéré comme cas d'utilisation typique, et les données utilisées ne sont pas toujours les données disponibles les plus précises. ProSim se dégage de toute responsabilité pour tout dommage provenant de l'utilisation des résultats de calculs basés sur cet exemple.

TABLE DES MATIERES

1. INTRODUCTION	3
2. MECANISME REACTIONNEL	3
3. CONSTITUANTS	3
4. MODELE THERMODYNAMIQUE	4
5. MODELE CINETIQUE	4
6. IMPLEMENTATION DU MODELE CINETIQUE EN UTILISANT SIMULIS REACTIONS	5
7. SIMULATION	6
7.1. Description du procédé	6
7.1.1. Réacteur	6
7.1.2. Dispositif de chauffage/refroidissement	8
7.1.3. Agitateur	9
7.1.4. Alimentation	9
7.1.5. Mode opératoire	10
7.2. Résultats	11
7.3. Simulation d'un cas de panne	13
8. BIBLIOGRAPHIE	15
9. NOMENCLATURE	16

1. INTRODUCTION

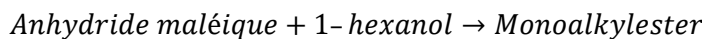
Cet exemple traite de la synthèse d'un monoalkylester à partir d'anhydride maléique et de 1-hexanol. Seule la phase liquide est considérée. Certains éléments techniques sont pris en compte, tels que :

- ✓ Dispositif de chauffage/refroidissement de la cuve,
- ✓ Agitateur.

Le mode opératoire ne comprend qu'une seule étape opératoire durant laquelle se déroule la réaction. De ce mode opératoire sera dérivé un cas permettant d'étudier un scénario de panne autour du réacteur.

2. MECANISME REACTIONNEL

Le mécanisme réactionnel est le suivant :



Soit :



3. CONSTITUANTS

Les constituants pris en compte dans la simulation sont les suivants :

Nom	Formule	Numéro CAS
Anhydride maléique(*)	C ₄ H ₂ O ₃	108-31-6
1-hexanol(*)	C ₆ H ₁₄ O	111-27-3
Monoalkylester	C ₁₀ H ₁₆ O ₄	55000-01-6

Les constituants suivis d'un astérisque proviennent de la base de données standard de Simulis Thermodynamics, serveur de calculs de propriétés physico-chimiques et d'équilibres entre phases utilisé dans BatchReactor. Les propriétés thermodynamiques stockées dans cette base de données sont issues de la base DIPPR [ROW17].

Le monoalkylester a été créé en utilisant la fonctionnalité « Cloner ce constituant » dans Simulis Thermodynamics. Le constituant cloné est l'acide sébacique (numéro CAS : 111-20-6). Les propriétés modifiées sont les suivantes :

- ✓ Numéro CAS : Numéro arbitraire (55000-01-6)
- ✓ Formule chimique : C₁₀H₁₆O₄
- ✓ Poids moléculaire : 200,24752 g.mol⁻¹
- ✓ Enthalpie de vaporisation massique : Identique à celle de l'acide sébacique(**)
- ✓ Chaleur spécifique massique vapeur : Identique à celle de l'acide sébacique(**)
- ✓ Chaleur spécifique molaire liquide

$$C_{pL} = 163500 + 652,299988 \times T$$

- ✓ Masse volumique liquide : Identique à celle de l'acide sébacique(**)
- ✓ Viscosité dynamique liquide :

$$\ln(\mu_L) = -13,2580004 + \frac{3206,8999}{T} - 0,0298519991 \times \ln(T)$$

Pour les propriétés indiquées avec (**), les propriétés molaires, définies pour les constituants, ont été modifiées de façon à ce que les propriétés massiques soient identiques à celles de l'acide sébacique (ratio des masses molaires).

4. MODELE THERMODYNAMIQUE

Le réacteur est modélisé comme étant monophasique liquide (§ 7), ainsi aucun équilibre liquide-vapeur n'est pris en compte. Le profil thermodynamique « Idéal » est alors sélectionné dans Simulis Thermodynamics.

5. MODELE CINETIQUE

La cinétique de la synthèse du monoalkylester à partir de l'anhydride maléique et du 1-hexanol est modélisée par une loi d'Arrhenius :

$$r = k_0 \times \exp\left(-\frac{Ea}{RT}\right) \times C_{\text{Anhydride maléique}} \times C_{\text{1-hexanol}}$$

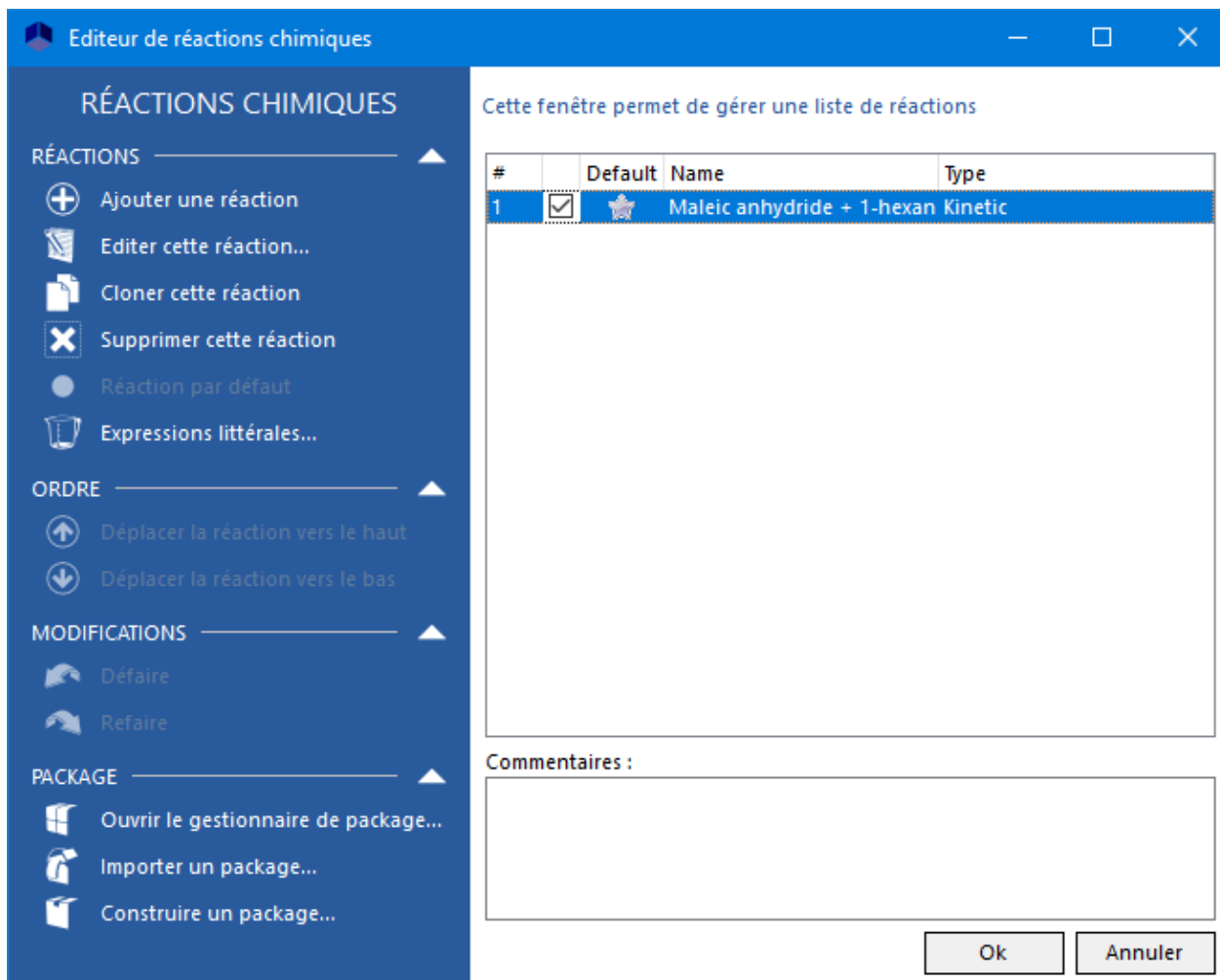
Avec :

$$k_0 = 4,92.10^{15} \text{ l. mol}^{-1} . \text{ h}^{-1}$$

$$Ea = 105 \text{ kJ. mol}^{-1}$$

6. IMPLEMENTATION DU MODELE CINETIQUE EN UTILISANT SIMULIS REACTIONS

La réaction présentée dans les paragraphes 2 et 5 a été décrite dans Simulis Reactions, comme illustré dans l'écran ci-dessous.



Cette réaction suit la loi classique d'Arrhénius. Elle est donc décrite dans l'interface standard de Simulis Reactions.

La réaction a lieu en phase liquide.

La chaleur de réaction est de -33 500 cal/mol (valeur négative car cette réaction est exothermique).

7. SIMULATION

7.1. Description du procédé

7.1.1. Réacteur

Le réacteur utilisé pour la réaction de synthèse du monoalkylester est un réacteur monophasique liquide.

Les conditions initiales sont présentées ci-dessous :

Conditions initiales	
Température	85°C
Pression	1 atm
Charge initiale	
Anhydride maléique	500 kg

La géométrie du bas de cuve est décrite dans l'écran ci-dessous :

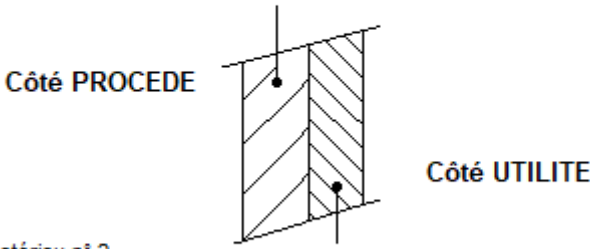
Image

Type de géométrie de fond de cuve
Torisphérique

Paramètres

Nombre de chicanes	0
Diamètre de la cuve (D)	1,2 m
Hauteur du fond de la cuve (H)	0 m
Rayon de courbure n°1 (R1)	1,2 m
Rayon de courbure n°2 (R2)	12 cm

Le réacteur est en acier inoxydable.

Nombre de matériaux de la paroi	1
Matériau n° 1	
Epaisseur	10 mm
Masse	0 kg
	
Matériau n° 2	
Epaisseur	0 m
Masse	0 kg

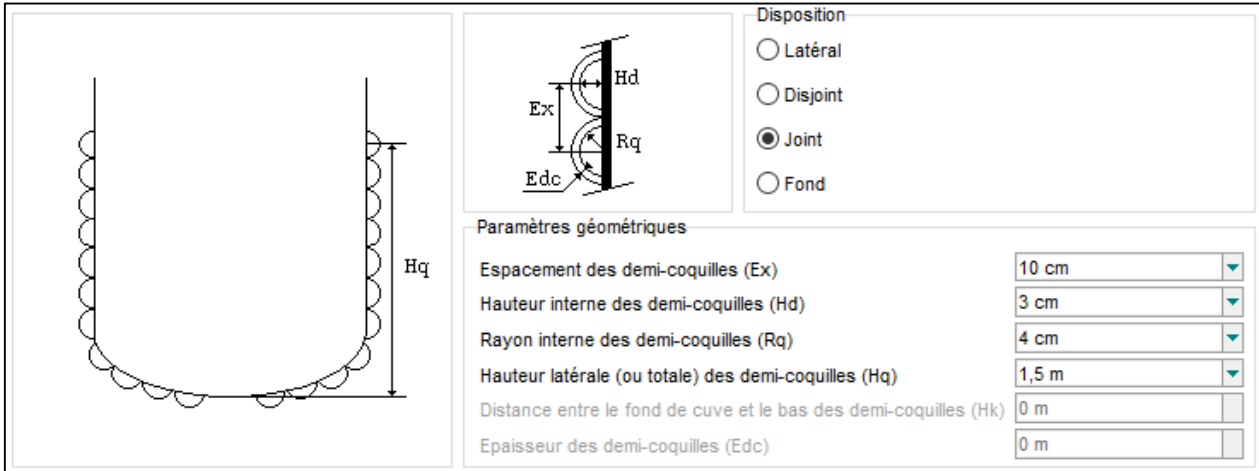
La conductivité thermique de l'acier inoxydable est considérée comme étant égale à $19 \text{ W/m}^1.\text{K}^{-1}$. La conductivité thermique est spécifiée pour chaque étape.

Les alarmes sont les suivantes :

	Volume	Température
Minimum	1 l	20°C
Maximum	10 m ³	200°C

7.1.2. Dispositif de chauffage/refroidissement

Le réacteur est équipé d'un dispositif d'échange par la paroi (demi-coquilles) dont les caractéristiques sont données ci-dessous :



Disposition

Latéral

Disjoint

Joint

Fond

Paramètres géométriques

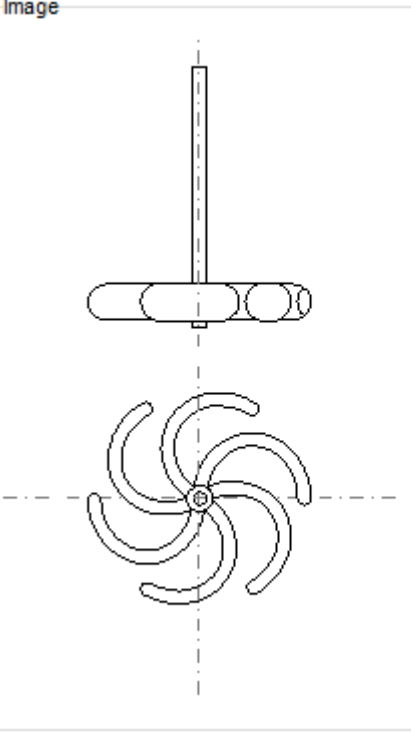
Espacement des demi-coquilles (Ex)	10 cm
Hauteur interne des demi-coquilles (Hd)	3 cm
Rayon interne des demi-coquilles (Rq)	4 cm
Hauteur latérale (ou totale) des demi-coquilles (Hq)	1,5 m
Distance entre le fond de cuve et le bas des demi-coquilles (Hk)	0 m
Epaisseur des demi-coquilles (Edc)	0 m

Les caractéristiques du fluide thermique utilisé sont résumées dans le tableau ci-dessous. La température d'entrée du fluide utilisé sera ajustée automatiquement afin de maintenir le réacteur à la température spécifiée.

Type	Autre
Température en entrée (valeur initiale)	25°C
Débit massique	10 000 kg/h
Nombre de points tabulés	1
Température de référence	20°C
Chaleur spécifique	1 cal.g ⁻¹ .K ⁻¹
Masse volumique	1 000 kg.m ⁻³
Viscosité dynamique	1 cP
Conductivité thermique	0,6 W.m ⁻¹ .K ⁻¹

7.1.3. Agitateur

Les caractéristiques de l'agitateur sont présentées dans l'écran ci-dessous. Sa vitesse de rotation est de 60 rpm pour chaque étape.

Image		Paramètres	
		Impeller monobloc à 6 pales	
		Diamètre du mobile d'agitation	0,9 m
		Hauteur du mobile d'agitation	0,3 m
		Distance ruban-cuve	0 m
		Largeur du ruban	0 m
		Nombre de puissance	1,8
		Constante énergétique en laminaire	55
		Pas de l'hélice / Diamètre de l'agitateur	1
		Hauteur des pales / Diamètre de cuve	0,0666666666666667
		Nombre d'agitateurs	1
Distance entre 2 agitateurs	0 m		
Coefficients "utilisateur" (immergé)		Coefficients "utilisateur" (paroi)	



La hauteur de l'agitateur correspond à la distance entre l'agitateur et le fond de la cuve.

7.1.4. Alimentation

Un flux continu en 1-hexanol (réactif de la réaction avec l'anhydride maléique) est alimenté tout au long de la simulation :

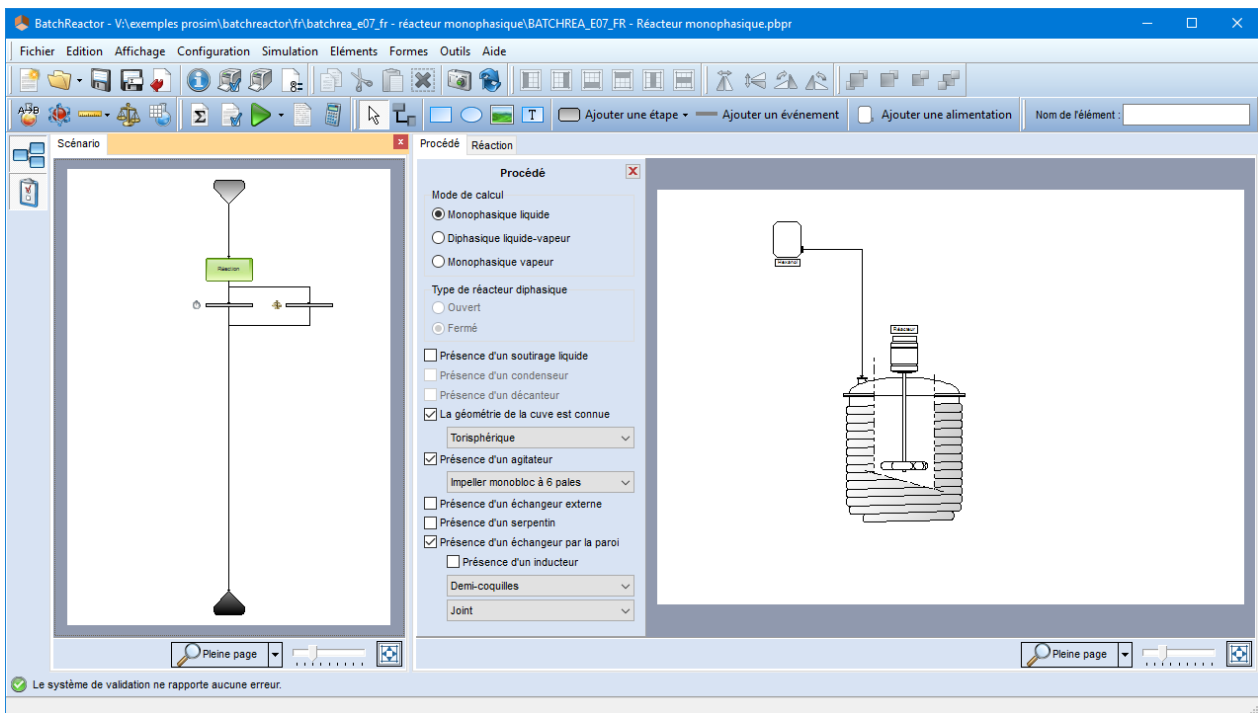
Température	95°C
Pression	1 atm
Débit de 1-hexanol	200 kg/h

7.1.5. Mode opératoire

Le mode opératoire comprend une unique étape opératoire durant laquelle un des réactifs est alimenté (1-hexanol) pour réagir avec l'autre réactif présent dans la charge initiale (anhydride maléique). La température du réacteur est maintenue constante à 85°C par action sur la température d'entrée du fluide utilisé.

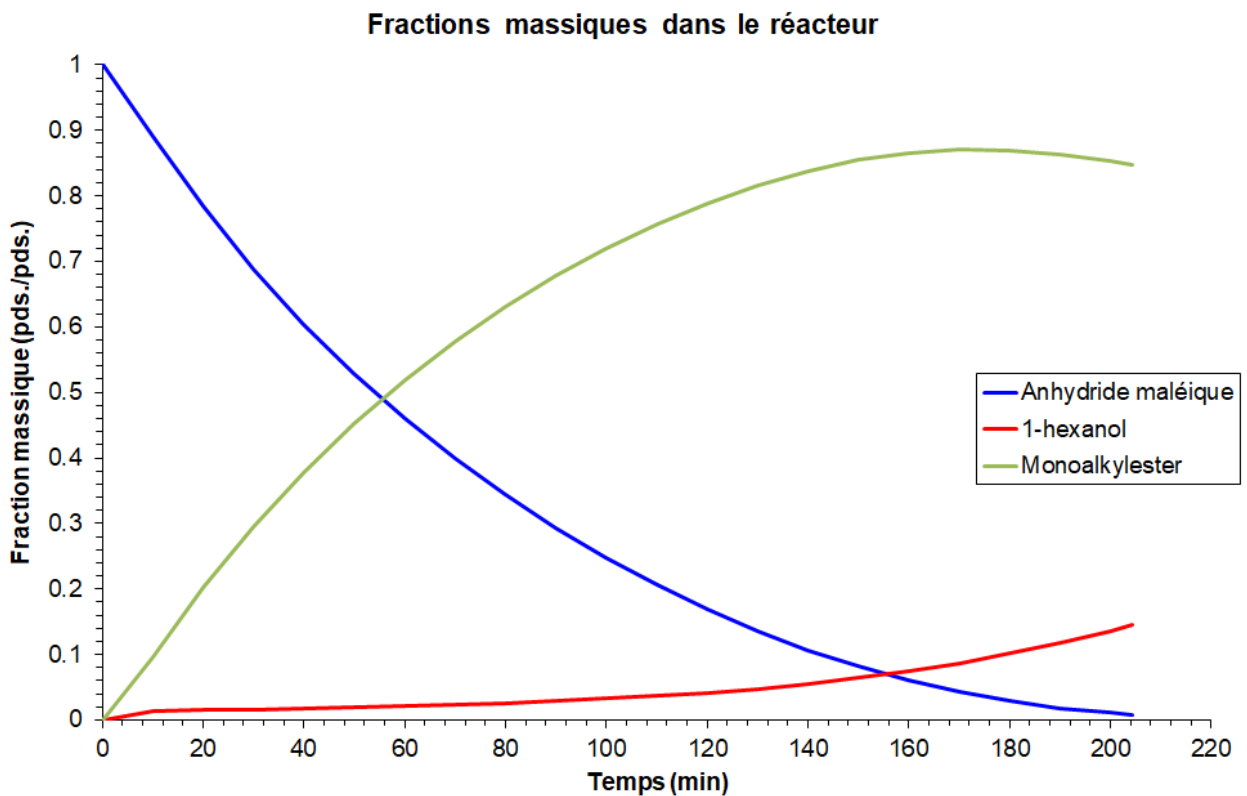
Paramètre	Etape
Type	Température du réacteur fixée avec dispositif thermique
Température	85°C
Pression du réacteur	1 atm
Evènement marquant l'arrêt	Temps écoulé depuis le début de l'étape = 5 h ou Charge partielle en anhydride maléique < 10 kg

Le scénario est présenté à gauche de l'écran, et le schéma procédé sur la droite.

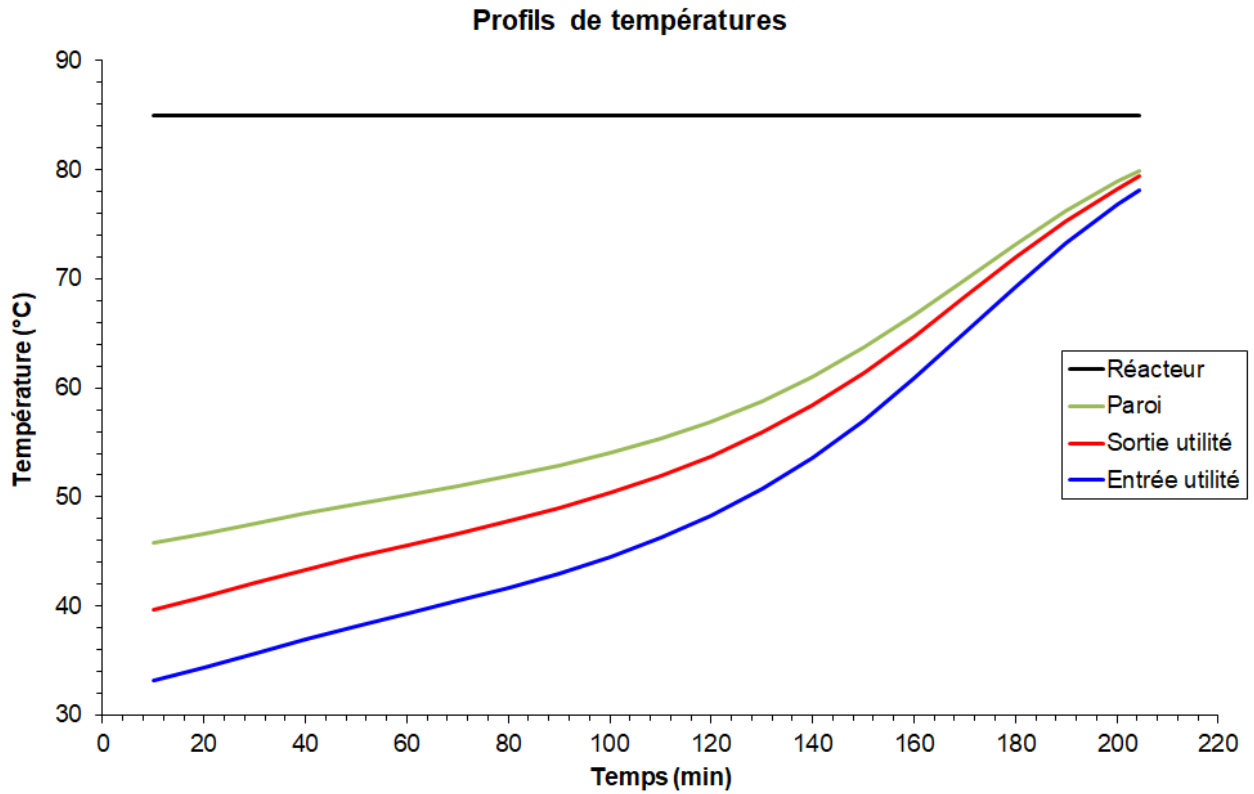


7.2. Résultats

La figure suivante montre l'évolution des fractions massiques dans le réacteur. La teneur en anhydride maléique ne fait que décroître. En effet, ce réactif est présent dans la charge initiale et n'est pas alimenté. Il est consommé tout au long de l'opération. La teneur en 1-hexanol ne cesse d'augmenter car il est alimenté à un débit supérieur à la consommation par la réaction. La teneur en monoalkylester croît jusqu'à ce que l'épuisement de l'anhydride maléique ralentisse fortement la réaction. La teneur en monoalkylester diminue alors par effet de dilution par l'alimentation en 1-hexanol qui n'est plus consommé (également en raison de l'épuisement de l'anhydride maléique).



La figure suivante présente les différents profils de température. La température du réacteur est bien maintenue constante à 85°C. La température d'entrée de l'utilité augmente au cours du temps. En effet, au fur et à mesure du temps la réaction se ralentit et donc dégage moins de chaleur. Ainsi, à débit d'utilité constant, celle-ci n'a plus besoin d'être aussi froide pour évacuer la chaleur liée à la réaction chimique et ainsi maintenir la température du réacteur constante.



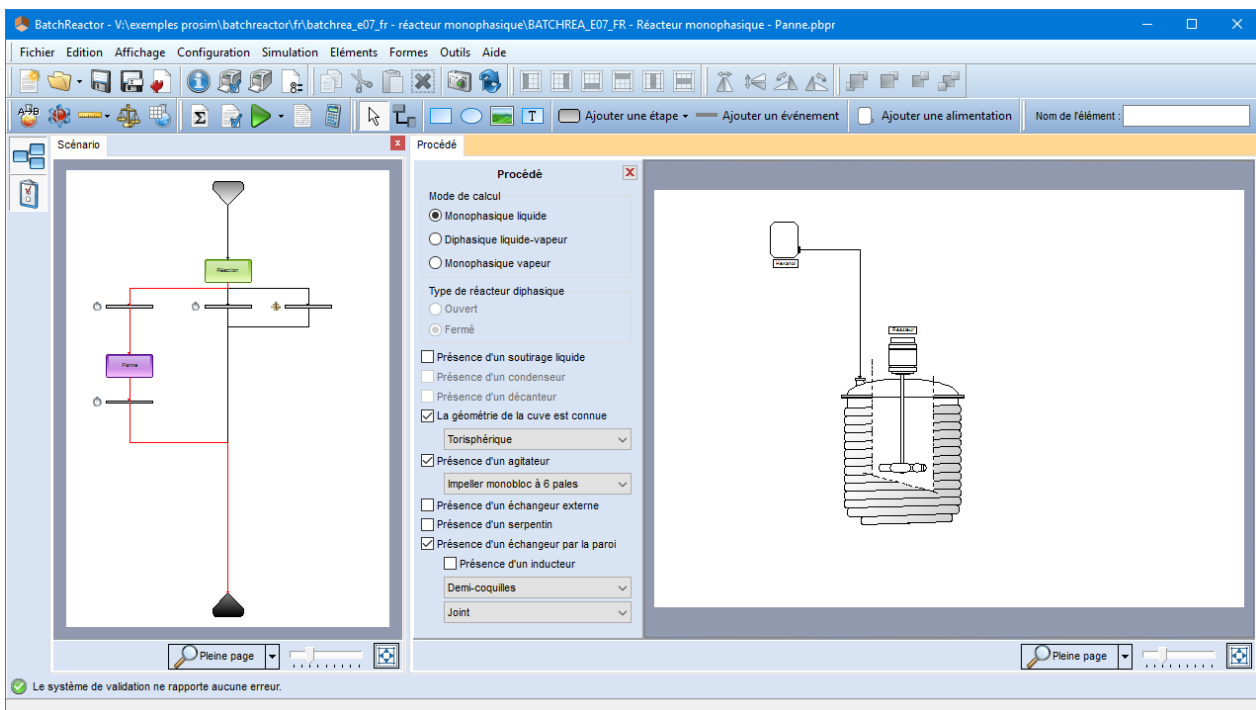
7.3. Simulation d'un cas de panne

L'objectif est de simuler l'arrêt simultané de l'agitation et de la régulation en température au bout d'une heure. L'alimentation en 1-hexanol est maintenue. Les modifications du mode opératoire apparaissent en rouge dans le tableau ci-après.

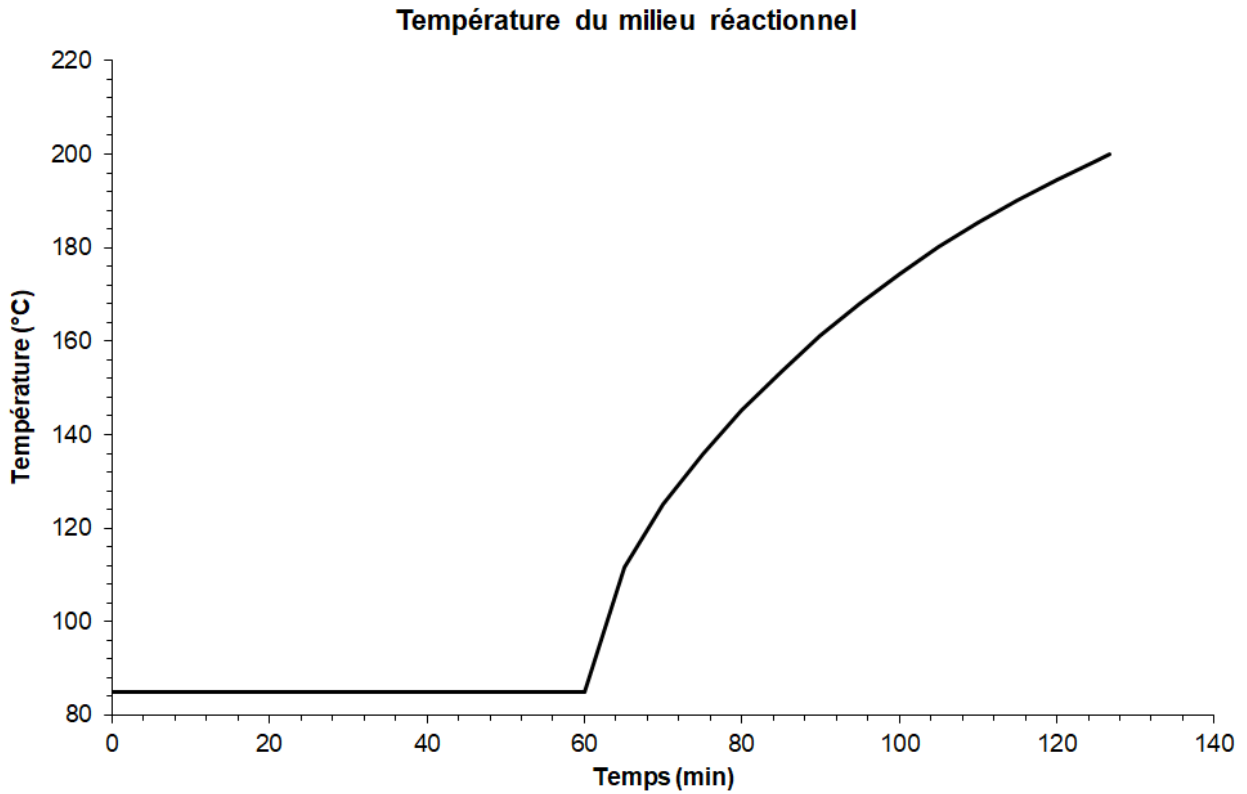
Paramètre	Etape de réaction	Etape de panne
Type	Température du réacteur fixée avec dispositif thermique	Flux thermique variable
Température	85°C	-
Pression du réacteur	1 atm	
Evènement marquant l'arrêt	Temps écoulé depuis le début de l'étape = 5 h (*) ou Charge partielle en anhydride maléique < 10 kg (*) ou Temps écoulé depuis le début de l'étape = 1 h	Temps écoulé depuis le début de l'étape = 5 h

Les évènements avec un (*) sont ceux du cas nominal, ils ont par conséquent été conservés.

Le scénario est présenté à gauche de l'écran, et le schéma procédé sur la droite.



La figure ci-dessous montre l'évolution de la température du milieu réactionnel. Lors de l'arrêt de l'agitation au bout d'une heure, le transfert thermique ne se fait plus que par convection naturelle ; il est donc moins efficace. De plus, l'arrêt de la régulation n'abaisse plus en conséquence la température d'entrée du fluide utilisé. La température du milieu réactionnel augmente alors pour atteindre la valeur d'alarme maximale définie (200°C) en un peu plus d'une heure.



8. BIBLIOGRAPHIE

- [ROW17] ROWLEY R.L., WILDING W.V., OSCARSON J.L., GILES N.F., “DIPPR® Data Compilation of Pure Chemical Properties”, Design Institute for Physical Properties, AIChE, New York, NY (2017)

9. NOMENCLATURE

C_i	Concentration du constituant i	mol.l ⁻¹
Cp_L	Chaleur spécifique liquide	J.kmol ⁻¹ .K ⁻¹
Ea	Energie d'activation de la réaction	J.mol ⁻¹
k_0	Facteur pré-exponentiel de la réaction	l.mol ⁻¹ .h ⁻¹
r	Vitesse de la réaction	mol.l ⁻¹ .h ⁻¹
R	Constante des gaz parfaits	J.mol ⁻¹ .K ⁻¹
T	Température	K
μ_L	Viscosité dynamique liquide	Pa.s