fives
Industry can do it

EXEMPLE D'APPLICATION BATCHREACTOR

REACTEUR MONOPHASIQUE AVEC SYSTEME DE CHAUFFE – ANALYSE DE RISQUE

INTERET DE L'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 évènements d'arrêt pour une même étape. Cet exemple permet également de simuler un cas de panne sur le réacteur.

DIFFUSION	☑ Libre Internet	☐ Réservée clients	☐ Restreinte	☐ Confidentielle

FICHIERS BATCHREACTOR CORRESPONDANTS	*BATCHREA_EX_FR-Reacteur-monophasique.pbpr* *BATCHREA_EX_FR-Reacteur-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 réel il ne doit pas être considéré comme un modèle de ce type de procédé et les données utilisées ne sont pas toujours les plus exactes disponibles. Fives ProSim ne pourra en aucun cas être tenu pour responsable de l'application qui pourra être faite des calculs basés sur cet exemple.

Fives ProSim
Siège social : Immeuble Stratège A - 51 rue Ampère - 31670 Labège - FRANCE
Tél. : +33 (0)5 62 88 24 30
S.A.S. au capital de 147 800 € - 350 476 487 R.C.S. Toulouse - Siret 350 476 487 00037 - APE 5829C - N° TVA FR 10 350 476 487
www.fivesgroup.com / www.fives-prosim.com

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 15

Copyright © 2025 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

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 :

$$Anhydride\ maléique + 1\text{–}hexanol \rightarrow Monoalkylester$$

Soit :

$$C_4H_2O_3 + C_6H_{14}O \rightarrow C_{10}H_{16}O_4 \qquad \text{(R1)}$$

3. CONSTITUANTS

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

Nom	Formule	Numéro CAS[1]
Anhydride maléique(*)	$C_4H_2O_3$	108-31-6
1-hexanol(*)	$C_6H_{14}O$	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 [ROW23].

Le monoalkylester a été créé en utilisant la fonctionnalité « Cloner ce constituant » dans Simulis Thermodynamics. Le constituant cloné est l'acide sébacique[1] (numéro CAS : 111-20-6). Les propriétés modifiées sont les suivantes :

- ✓ Numéro CAS : Numéro arbitraire (55000-01-6)
- ✓ Formule chimique : $C_{10}H_{16}O_4$
- ✓ 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(**)

[1] *CAS Registry Numbers® are the intellectual property of the American Chemical Society and are used by Fives ProSim SAS with the express permission of ACS. CAS Registry Numbers® have not been verified by ACS and may be inaccurate.*

Copyright © 2025 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

- ✓ Chaleur spécifique molaire liquide

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

- ✓ 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 :

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

Avec :

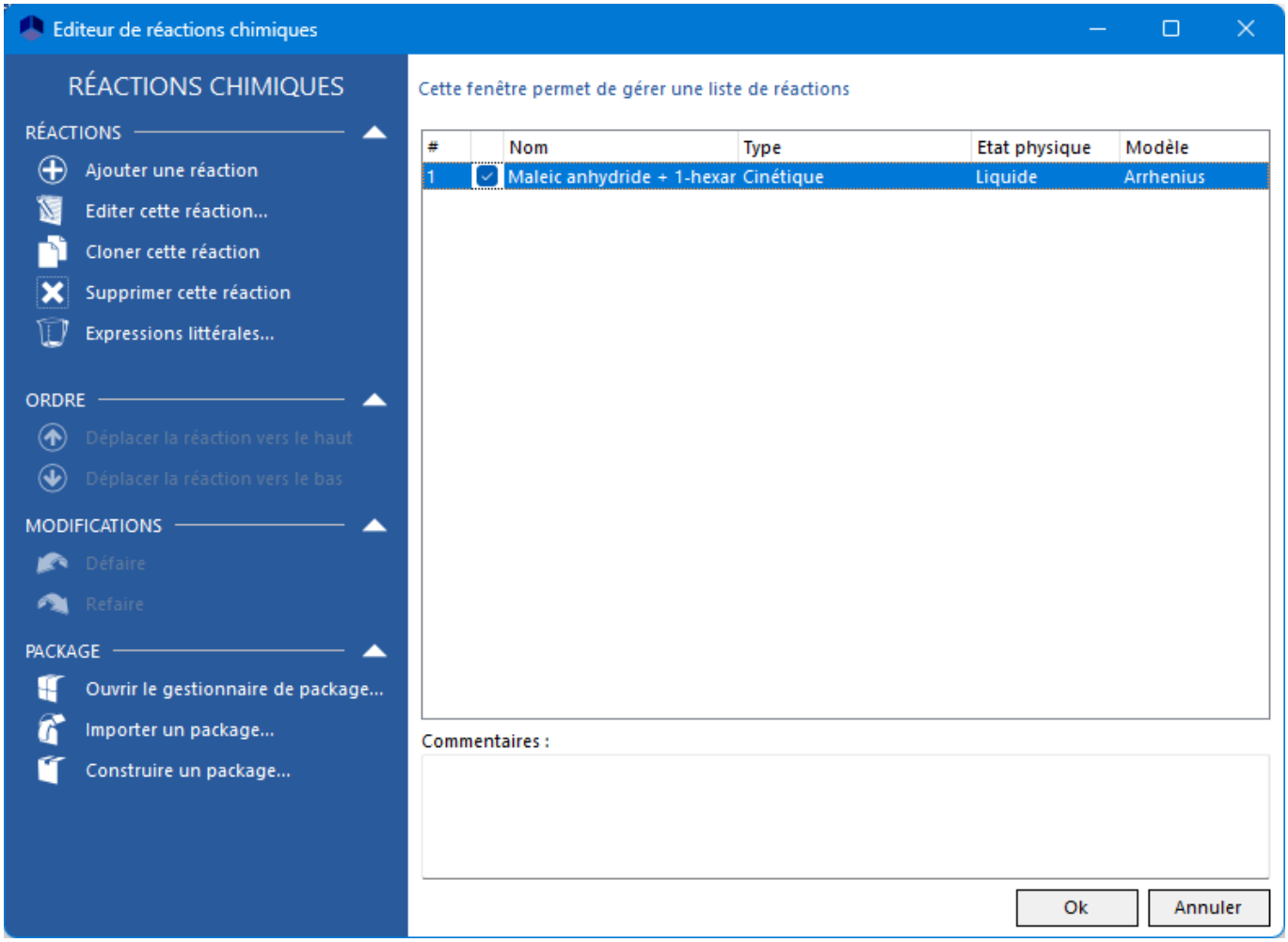
$$k_0 = 4{,}92.10^{15} l.mol^{-1}.h^{-1}$$

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

Copyright © 2025 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

6. IMPLEMENTATION DU MODELE CINETIQUE EN UTILISANT SIMULIS REACTIONS

La réaction présentée dans les paragraphes 2 et 0 a été decrite 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).

Copyright © 2025 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

7. SIMULATION

7.1. Description du procédé

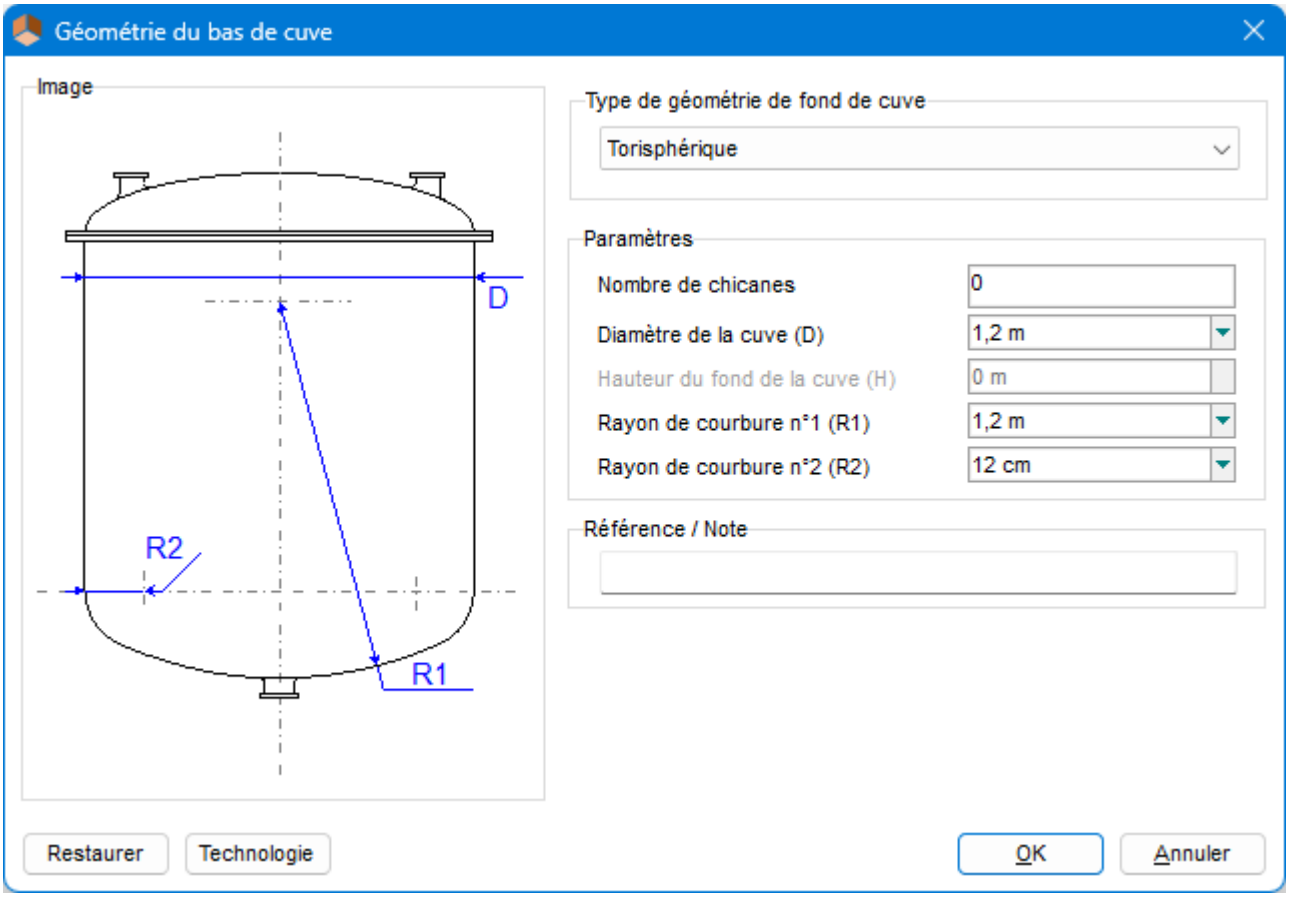
7.1.1. Réacteur

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

Les conditions initiales sont présentées ci-dessous :

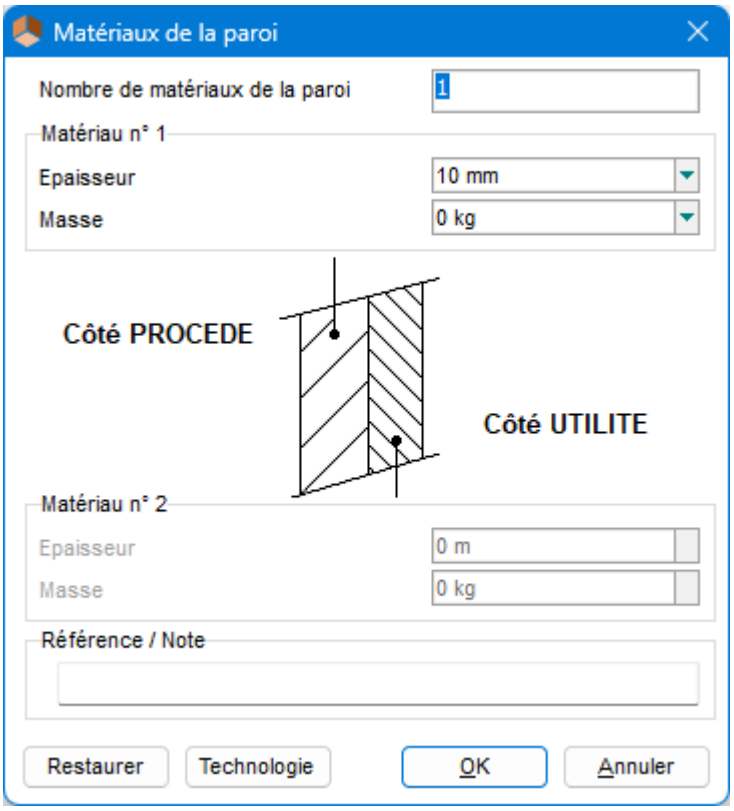
Conditions initiales	
Température	85°C
Pression	1 atm
Charge initiale	
Anhydride maléique	500 kg

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



Copyright © 2025 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

Le réacteur est en acier inoxydable.



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

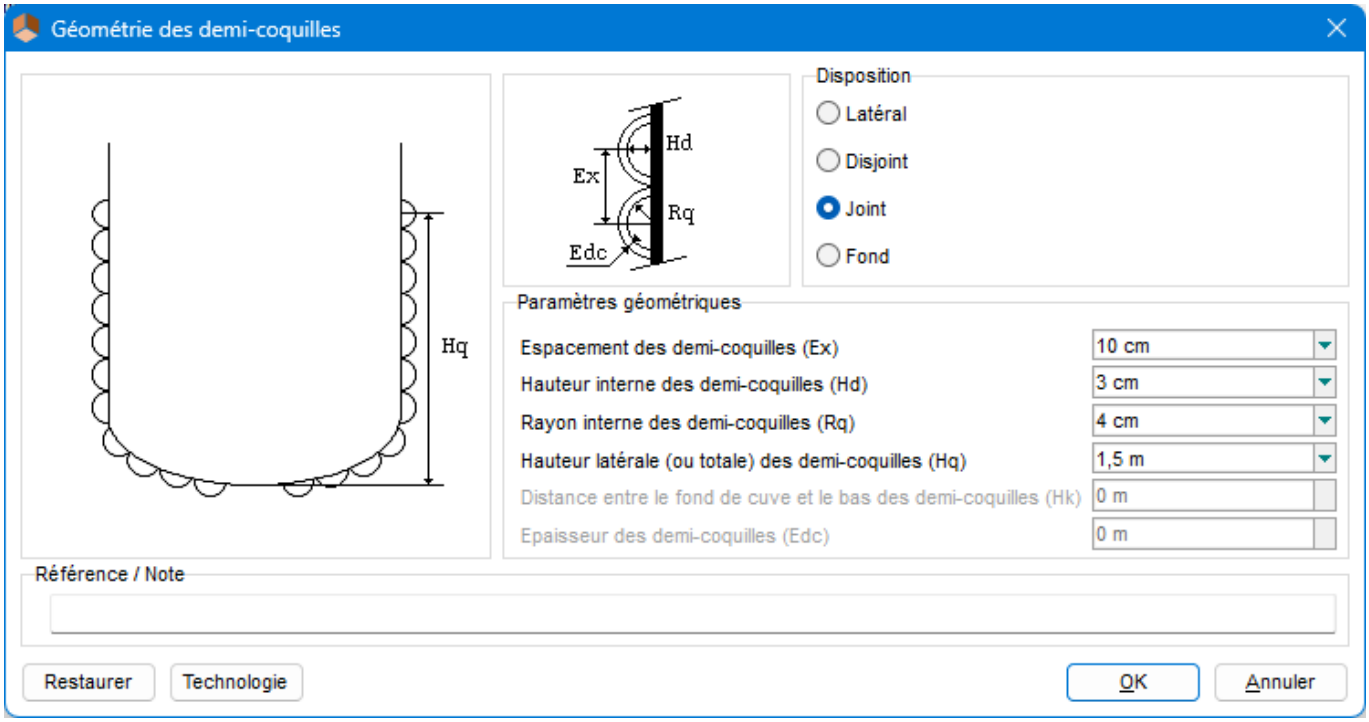
Les alarmes sont les suivantes :

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

Copyright © 2025 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

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 :



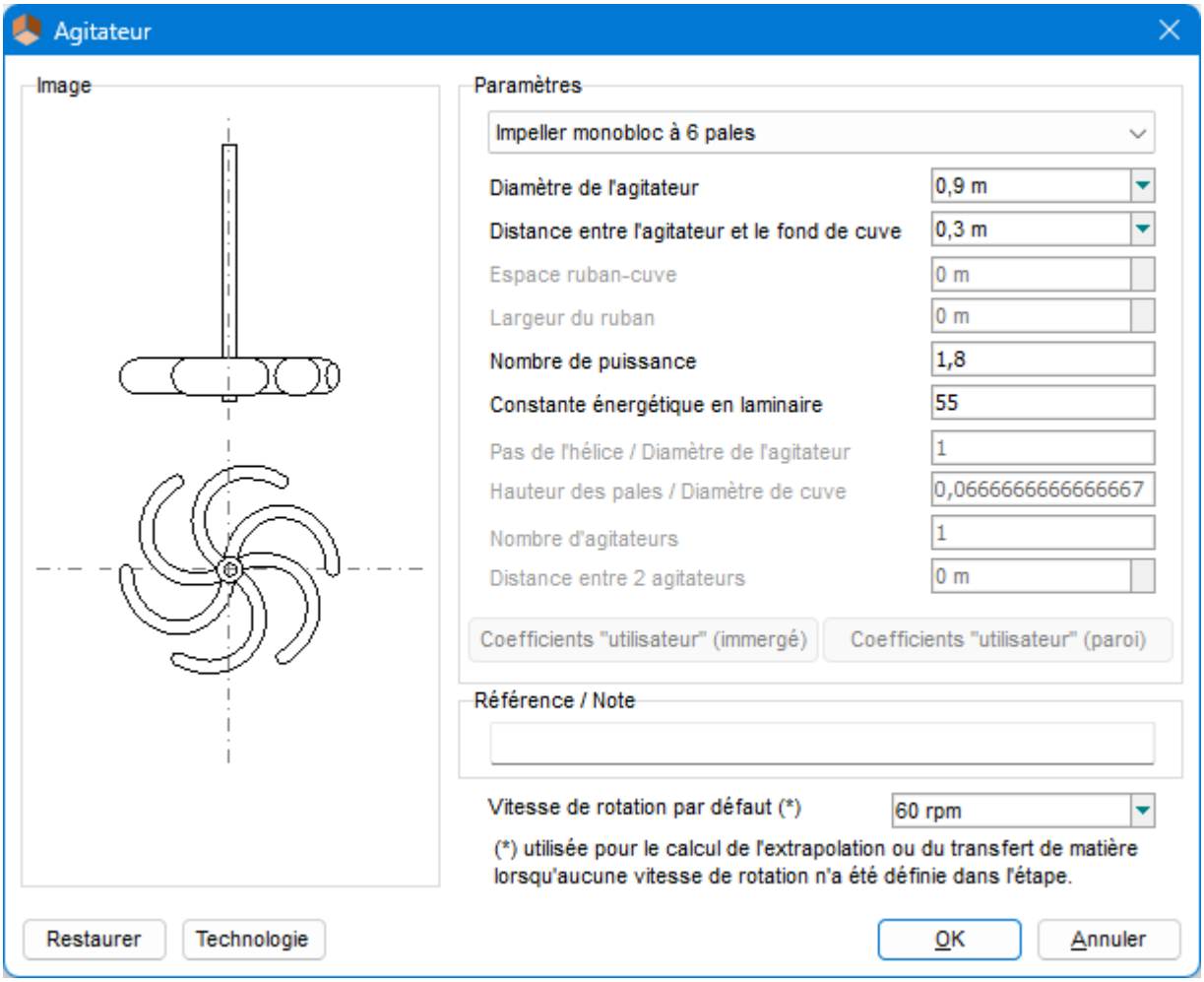
Les caractéristiques du fluide thermique utilisé sont résumées dans le tableau ci-dessous. La température d'entrée du fluide utilité sera ajustée automatiquement afin de maintenir le réacteur à la température spécifiée.

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 $W.m^{-1}.K^{-1}$

Copyright © 2025 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

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.



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

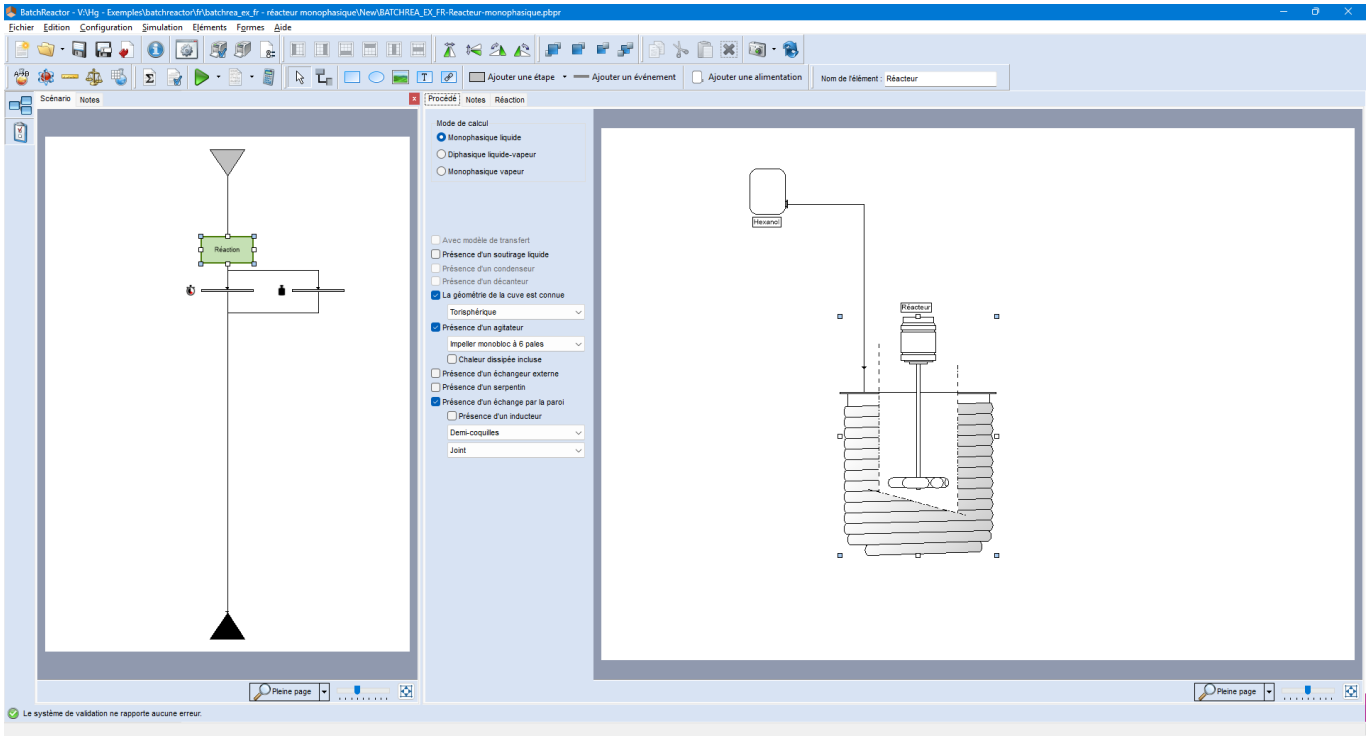
Copyright © 2025 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

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 utilité.

Paramètre	Etape
Type	Contrôle de la température du réacteur
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

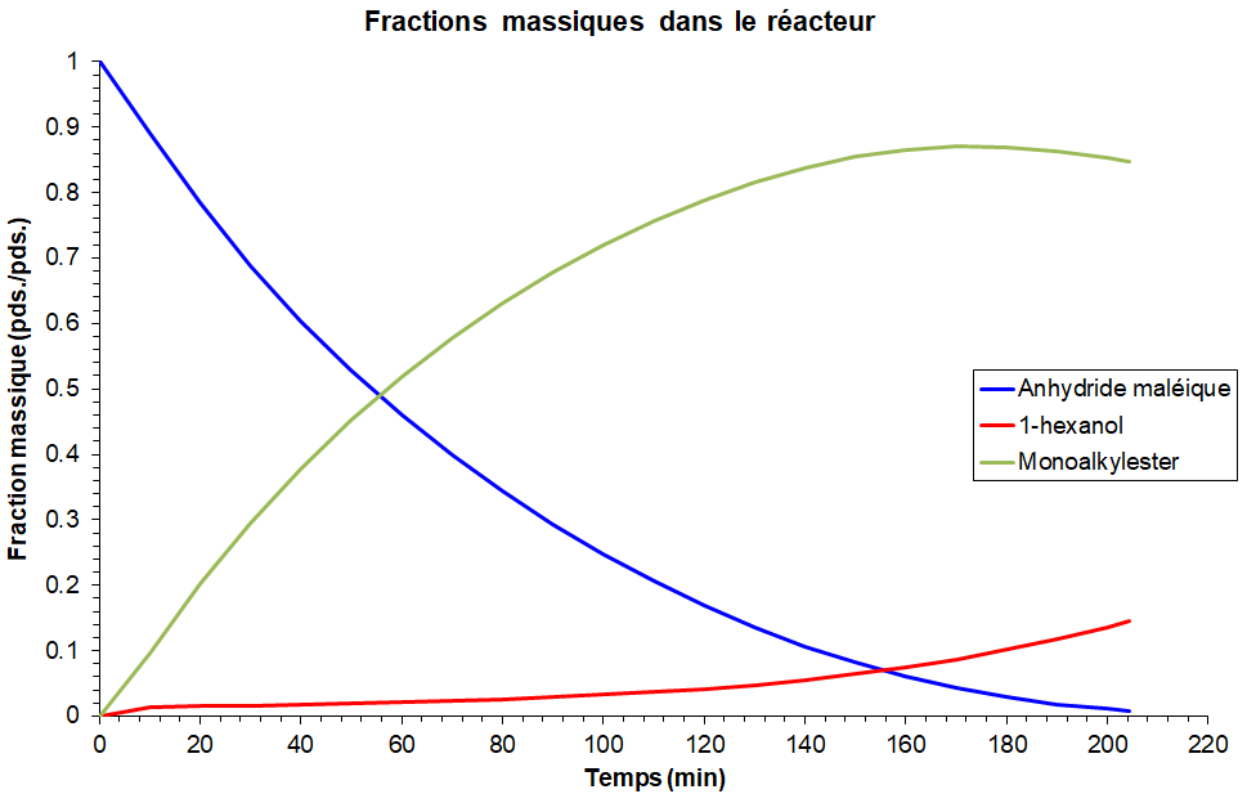
Le scénario est présenté à gauche de l'écran, et le schéma procédé sur la droite.



Copyright © 2025 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

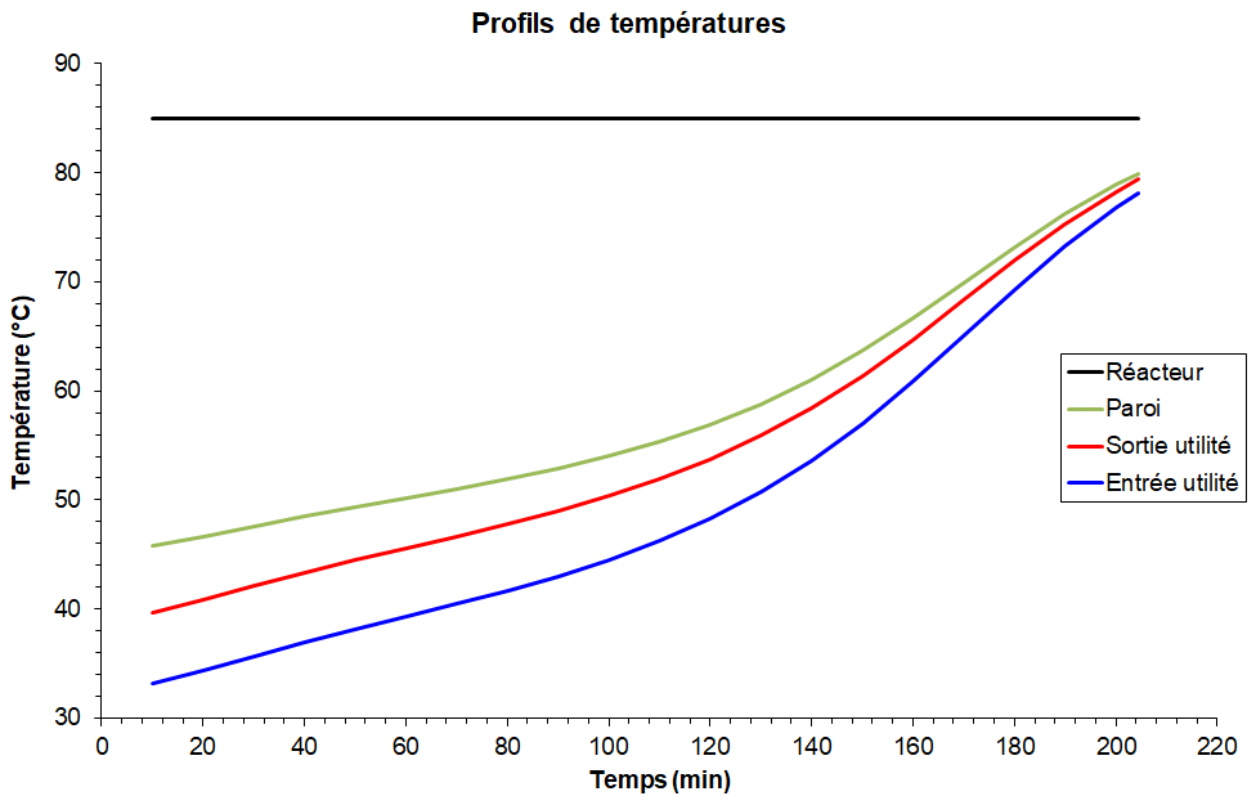
7.2. Résultats

La figure suivante montre l'évolution des fractions massiques dans le réacteur. La teneur en anhydride maléique ne fait que décroitre. 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).



Copyright © 2025 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

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.



Copyright © 2025 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

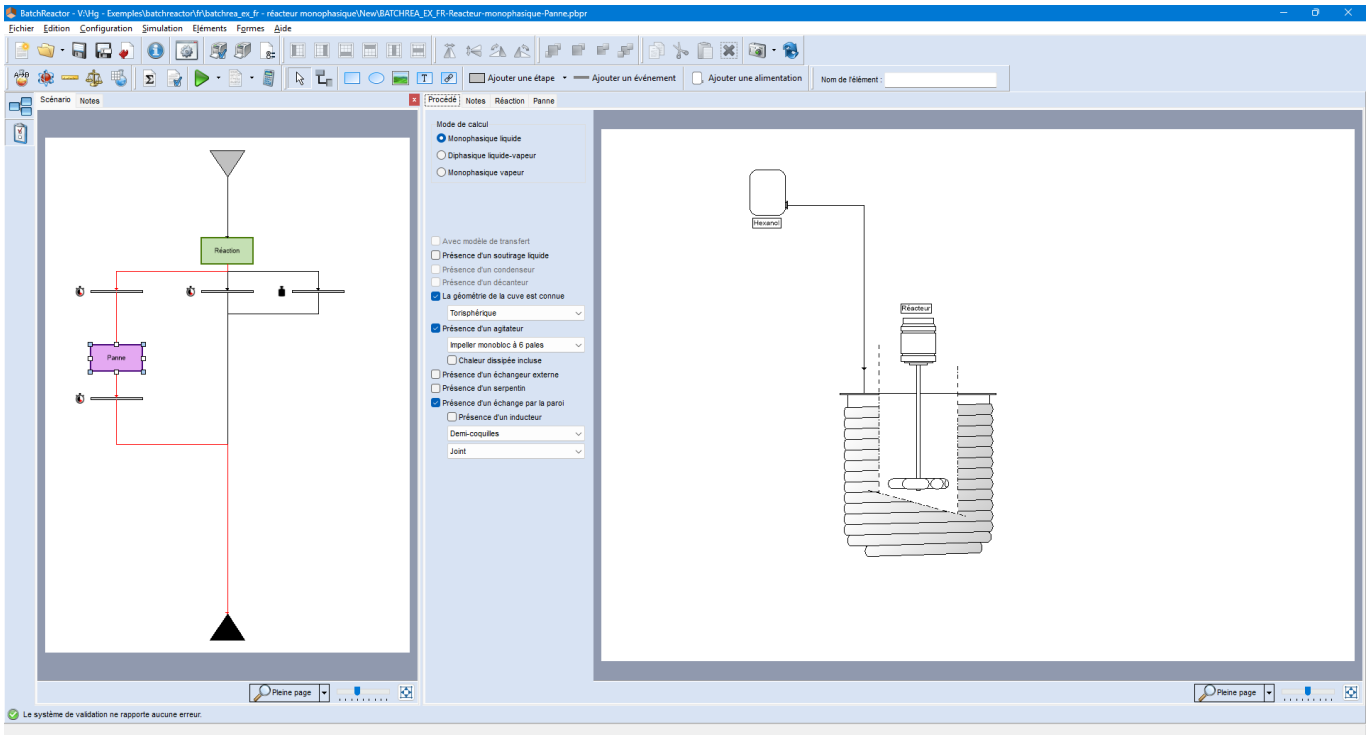
7.3. Simulation d'un cas de panne

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	Contrôle de la température du réacteur	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

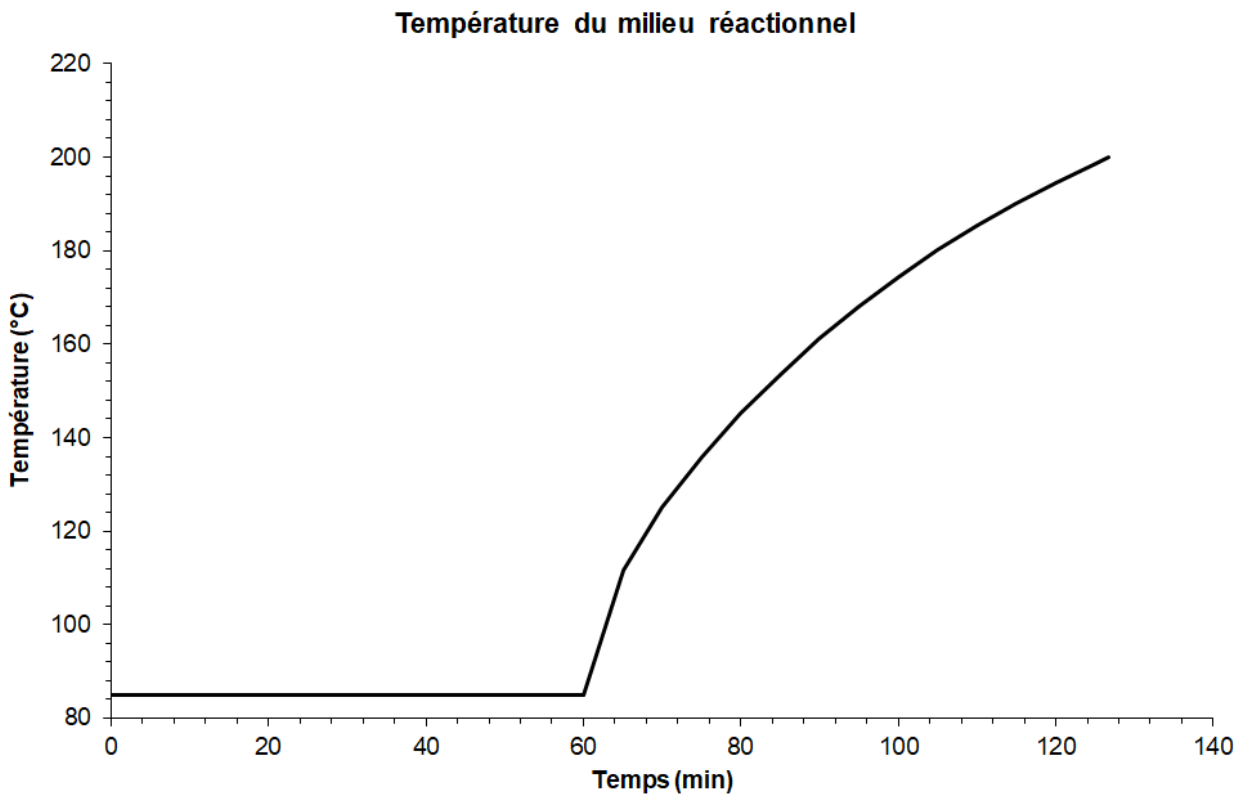
Les évènements avec un (*) sont ceux du cas nominal, ils ont par conséquents été conservés.

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



Copyright © 2025 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

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 utilité. La température du milieu réactionnel augmente alors pour atteindre la valeur d'alarme maximale définie (200°C) en un peu plus d'une heure.



Copyright © 2025 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

8. BIBLIOGRAPHIE

[ROW23] 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 (2023)

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

Copyright © 2025 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés