fives
Industry can do it

EXEMPLE D'APPLICATION BATCHREACTOR

SIMULATION D'UN SCENARIO DE MONTEE EN PRESSION D'UN REACTEUR DIPHASIQUE

INTERET DE L'EXEMPLE
Cet exemple présente un cas simple de montée en pression d'un réservoir, suivie d'une dépressurisation après rupture du disque de sécurité. Les caractéristiques du flux à l'évent et l'évolution de la charge du réservoir sont suivies au cours du temps.

DIFFUSION	☑ **Libre Internet**	☐ **Réservée clients**	☐ **Restreinte**	☐ **Confidentielle**

FICHIER BATCHREACTOR CORRESPONDANT	*BATCHREA_EX_FR-Montee-en-pression.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.

TABLE DES MATIERES

1. INTRODUCTION 3

2. CONSTITUANTS 3

3. MODELE THERMODYNAMIQUE 3

4. SIMULATION 4

4.1. Description du procédé 4

4.1.1. Réacteur 4

4.1.2. Mode opératoire 4

4.2. Résultats 6

5. BIBLIOGRAPHIE 9

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

1. INTRODUCTION

Cet exemple traite de l'étude d'un scénario de montée en pression d'une capacité. Dans une première étape, le réservoir étant fermé est soumis à un flux thermique, la pression monte jusqu'à la pression de rupture définie pour le disque de sécurité. Dans la seconde étape, le réservoir se dépressurise avec un débit supposé constant. Enfin, le réacteur évolue à la pression atmosphérique.

Dans ce cas simple, aucune réaction ni aucun système de chauffe ne sont pas pris en compte.

2. CONSTITUANTS

Les constituants intervenant dans la simulation sont les suivants :

Nom	Formule	Numéro CAS[1]
Eau	H_2O	7732-18-5
Méthanol	CH_4O_2	67-56-1
Azote	N_2	7727-37-9

Ils 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].

3. MODELE THERMODYNAMIQUE

Le modèle thermodynamique NRTL [REN68] est utilisé pour modéliser les équilibres entre phases. Les paramètres d'interaction binaire pour le binaire eau – méthanol sont issus de la base de données de Simulis Thermodynamics. Aucun paramètre d'interaction binaire n'est défini pour les binaires eau – azote et méthanol – azote.

[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

4. SIMULATION

4.1. Description du procédé

4.1.1. Réacteur

Le réacteur utilisé pour cet exemple est un réacteur fermé diphasique liquide-vapeur. Son volume est de 200 l. Le réacteur est initialement inerté à l'azote.

Les conditions initiales sont présentées ci-dessous :

Conditions initiales	
Température	25°C
Pression	1 atm
Charge initiale	
Charge totale	50 l
Eau	50% mol.
Méthanol	50% mol.

Les alarmes sont les suivantes :

	Volume	Température
Minimum	1 l	0°C
Maximum	190 l	200°C

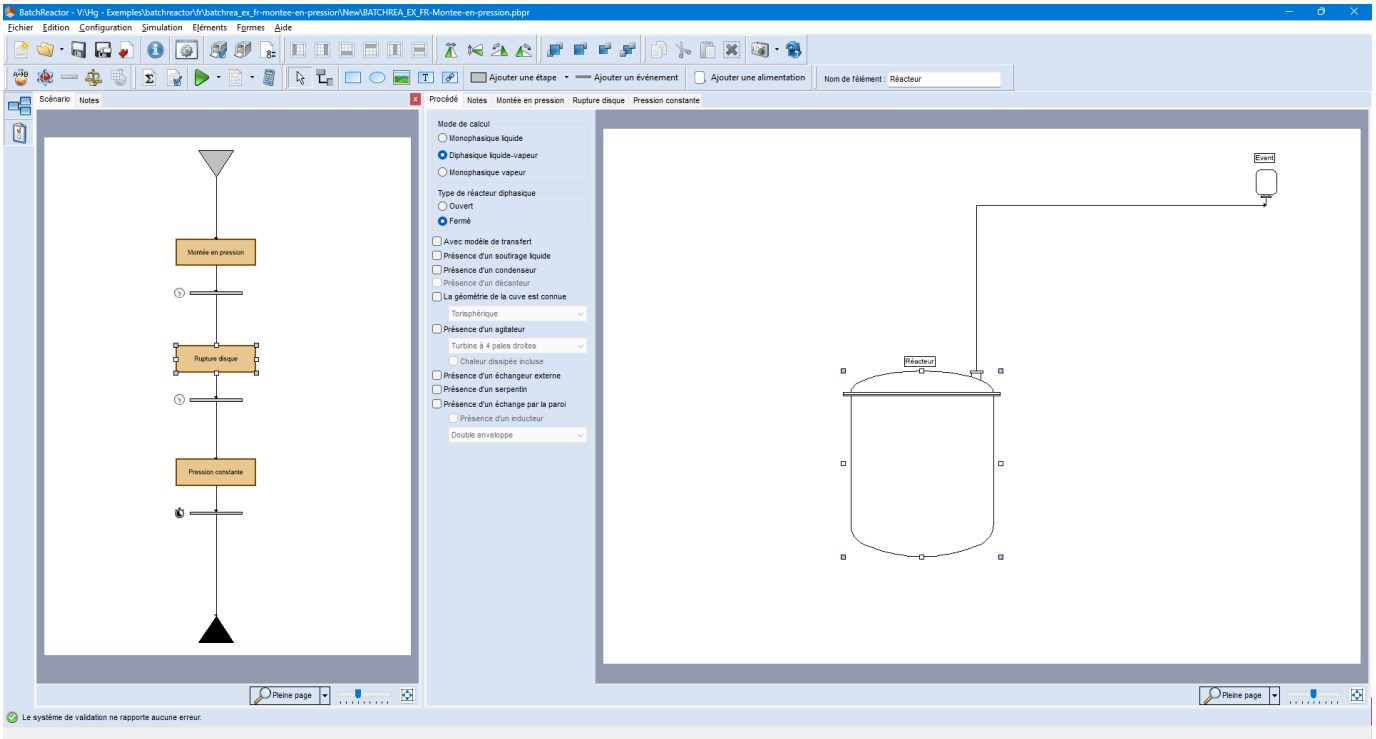
4.1.2. Mode opératoire

Le mode opératoire est constitué de trois étapes. Durant la première étape, le réservoir monte en pression jusqu'à la pression de rupture du disque de sécurité. La seconde étape modélise la dépressurisation résultant de la rupture du disque de sécurité. Durant la troisième étape, le réacteur évolue à pression atmosphérique.

Paramètre	Etape 1	Etape 2	Etape 3
Type	Flux thermique fixé		
Quantité de chaleur	10 kW		
Spécification de la pression	Débit vapeur constant		Pression constante
Production vapeur	0 kg/h	50 kg/h	-
Pression du réacteur	-		1 atm
Evènement marquant l'arrêt	Pression dans le réacteur = 10 bar	Pression dans le réacteur = 1 atm	Durée de la simulation = 1 h

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

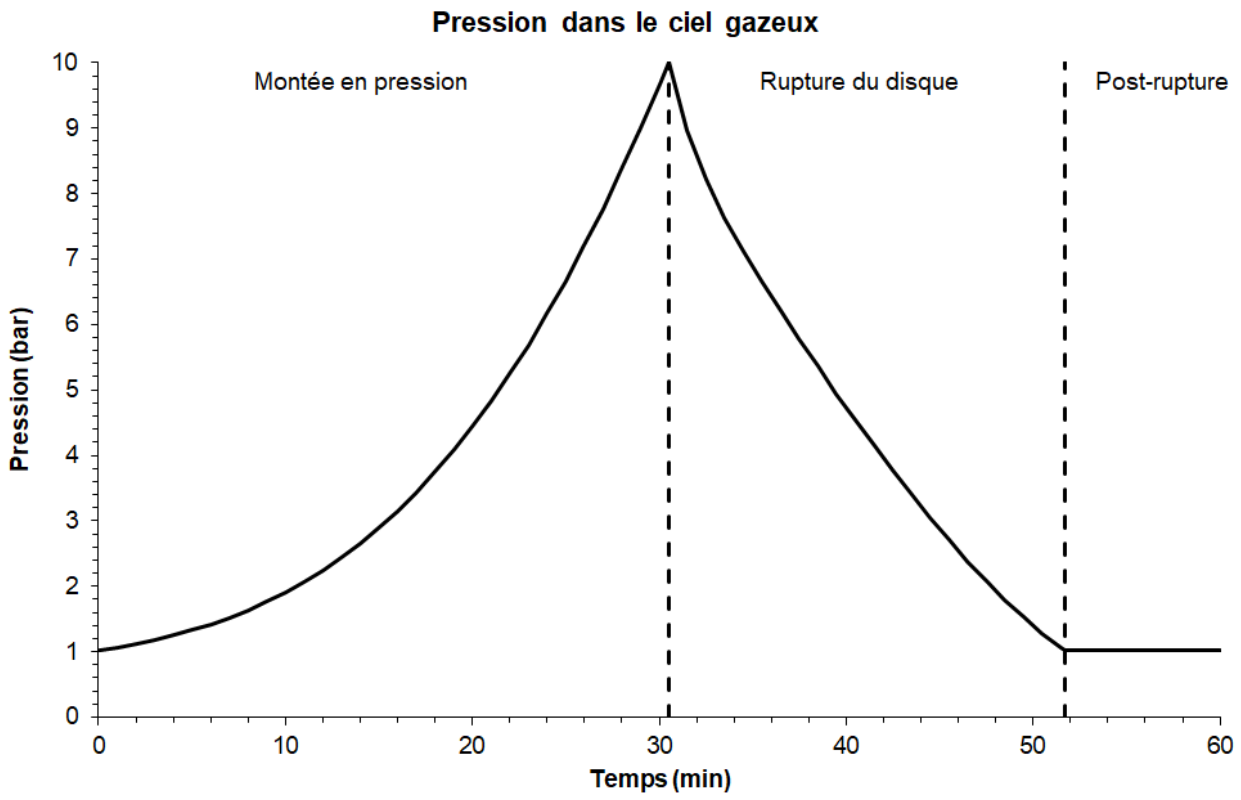
Le scénario est présenté à gauche de l'écran, et le schéma procédé sur la droite.



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

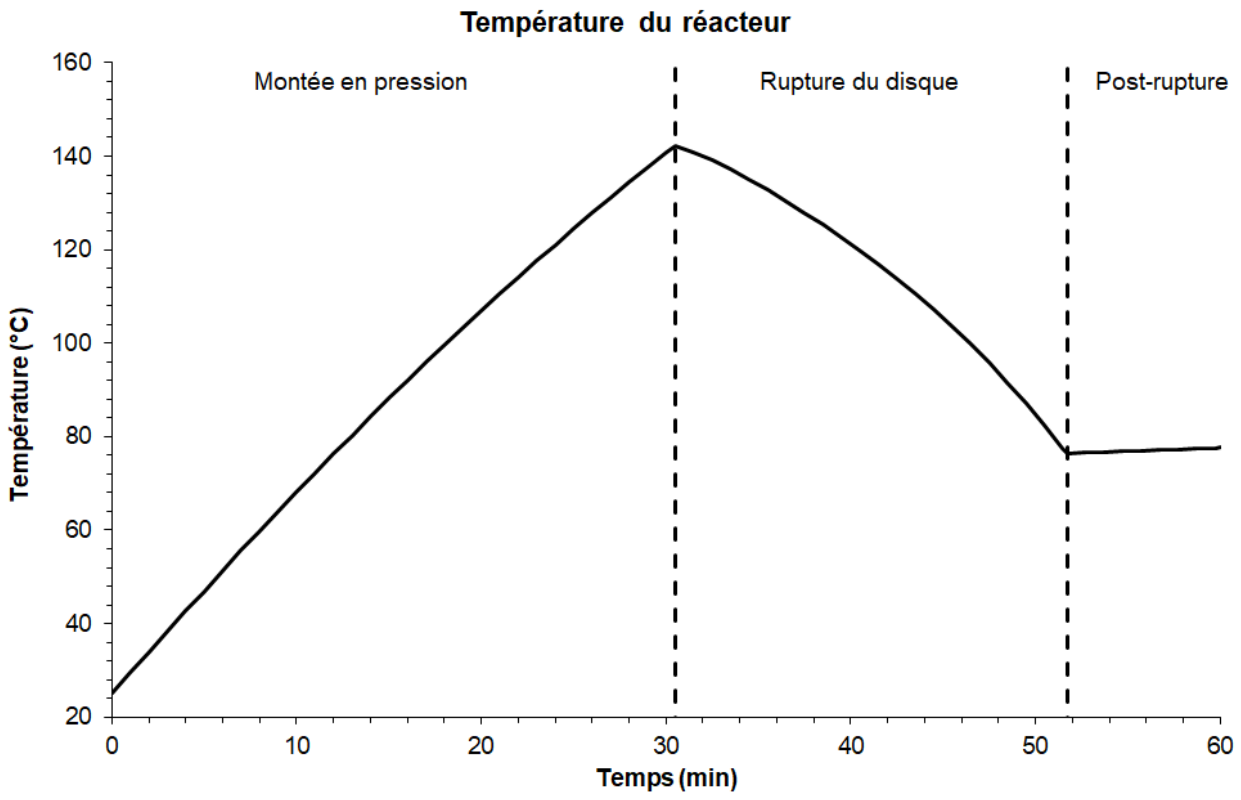
4.2. Résultats

La figure suivante montre l'évolution de la pression dans le ciel gazeux du réacteur. Tant que la pression est inférieure à la pression de rupture du disque de sécurité, l'évent étant fermé et la chauffe en marche, la pression dans le réacteur monte suite à la vaporisation de la charge. La pression de rupture du disque de sécurité (10 bar) est atteinte en un peu plus de 30 minutes.



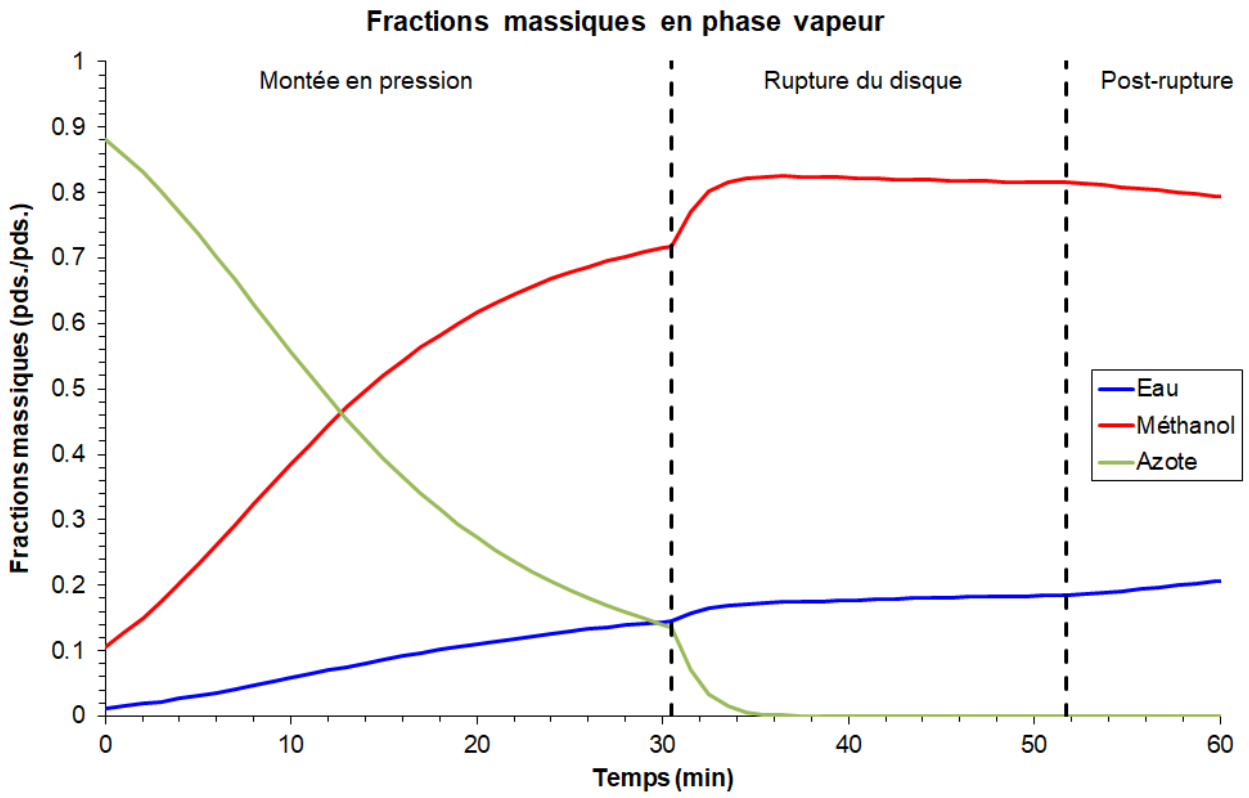
Copyright © 2025 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

La figure suivante montre l'évolution de la température du réacteur. Celle-ci augmente lors de la phase de montée en pression suite au chauffage du réservoir. La dépressurisation consécutive à la rupture du disque entraîne une diminution de la température par évaporation d'une partie de la charge. Dans la dernière phase le système est équilibré et la température croît de nouveau à cause de la chauffe du réacteur.



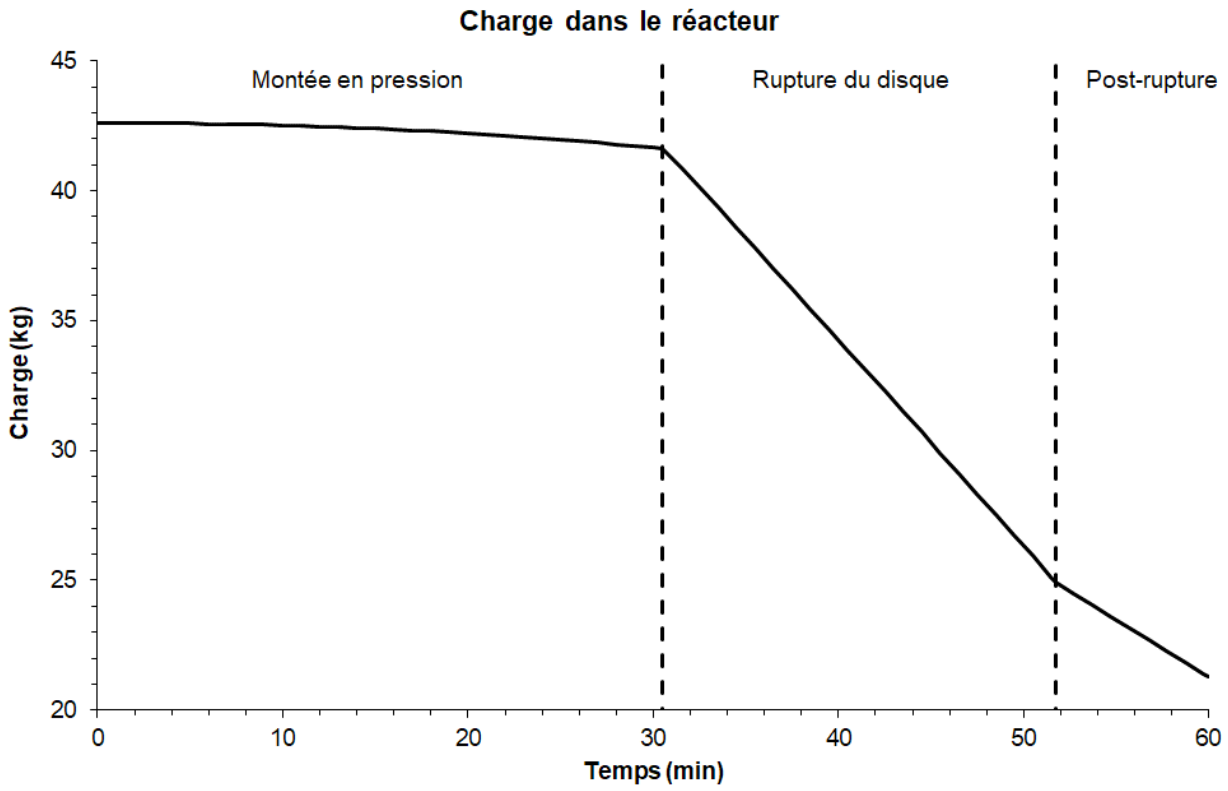
Copyright © 2025 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

La figure suivante montre l'évolution de la composition de la phase gaz du réacteur. La composition de la phase gaz quittant le réacteur après la rupture du disque se trouve dans la partie marquée « Rupture du disque » de cette figure. Elle est composée d'environ 80% massique de méthanol et de 20% massique d'eau.



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

La figure ci-dessous montre l'évolution de la charge dans le réacteur. Il indique que près de 40% de la charge massique initiale part lors de la rupture du disque.



5. BIBLIOGRAPHIE

[REN68] RENON H., J.M. PRAUSNITZ, "Local Compositions in Thermodynamic Excess Functions for Liquid Mixtures", AIChE J., 14(3), 135-144 (1968)

[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)

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