

EXEMPLE D'APPLICATION BATCHREACTOR

EXTRAPOLATION D'UN REACTEUR DE CHLORATION

INTERET DE L'EXEMPLE

L'intérêt principal de cet exemple est l'extrapolation d'un réacteur de chloration. La chloration de l'o-chlorotoluène est réalisée dans un réacteur diphasique liquide-vapeur. Le dispositif de chauffage/refroidissement du réacteur et la géométrie du condenseur sont spécifiés. Au cours de l'étape de réaction, le niveau de température dans le réacteur est contrôlé par un PID.

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

FICHIER BATCHREACTOR CORRESPONDANT

BATCHREA_E06_FR- Réacteur de chloration.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.

Energy

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	4
3.	CONSTITUANTS.....	4
4.	MODELE THERMODYNAMIQUE	5
5.	MODELE CINETIQUE.....	5
6.	IMPLEMENTATION DU MODELE CINETIQUE EN UTILISANT SIMULIS REACTIONS	6
7.	SIMULATION	7
7.1.	Description du procédé	7
7.1.1.	Réacteur	7
7.1.2.	Dispositif de chauffage/refroidissement	9
7.1.3.	Agitateur	10
7.1.4.	Condenseur	11
7.1.5.	Contrôleur PID.....	11
7.1.6.	Alimentations	12
7.1.7.	Mode opératoire	13
7.2.	« Astuces ».....	14
7.3.	Résultats	15
7.4.	Extrapolation	19
8.	BIBLIOGRAPHIE	24
9.	NOMENCLATURE	24

1. INTRODUCTION

Cet exemple traite de la chloration de l'o-chlorotoluène dans un réacteur diphasique liquide-vapeur mécaniquement agité. Certains éléments technologiques sont pris en compte, tels que :

- ✓ Le dispositif de chauffage/refroidissement de la cuve,
- ✓ L'agitateur,
- ✓ Le condenseur.

Le mode opératoire comprend deux étapes. La première correspond au chauffage de la charge initiale jusqu'à la température requise pour la réaction. La seconde étape est l'étape de réaction. La réaction démarre suite à l'injection de l'un des réactifs. Au cours de cette étape, le niveau de température dans le réacteur est contrôlé par un PID.

Enfin, l'extrapolation de ce réacteur dans le but de multiplier le volume par un facteur 3 est détaillée.

2. MECANISME REACTIONNEL

Le mécanisme réactionnel fait intervenir deux réactions de chloration.

Dans la première (principale), un groupe chlore est ajouté à l'*o*-chlorotoluène afin d'obtenir du dichloro-méthyle-benzène qui est le produit désiré.



soit :



Dans la réaction secondaire, un groupe chlore est ajouté au dichloro-méthyle-benzène afin d'obtenir du benzotrichlorure qui est un sous-produit indésirable.



soit :



3. CONSTITUANTS

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

Nom	Formule	Numéro CAS ¹
<i>o</i> -chlorotoluène	C ₇ H ₇ Cl	95-49-8
Dichloro-méthyle-benzène	C ₇ H ₆ Cl ₂	98-97-3
Benzotrichlorure	C ₇ H ₅ Cl ₃	98-07-7
Chlore	Cl ₂	7782-50-5
Chlorure d'hydrogène	HCl	7647-01-0
Azote	N ₂	7727-37-9

Les constituants 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 physico-chimiques stockées dans cette base de données sont issues de la base DIPPR [ROW23].

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.

4. MODELE THERMODYNAMIQUE

Le modèle thermodynamique NRTL [REN68] est utilisé pour modéliser l'équilibre liquide-vapeur. Des paramètres d'interaction binaires sont définis pour les trois binaires suivants :

Binaires	C_{ij}	C_{ji}	α_{ij}	C_{ij}^T	C_{ji}^T	α_{ij}^T
o-chlorotoluène – Dichloro-méthyle-benzène	-707,3	775,31	0,1939	0	0	0
o-chlorotoluène – Benzotrichlorure	-1246	1463,5	0,1584	0	0	0
Dichloro-méthyle-benzène – Benzotrichlorure	64,339	-79,04	0,4097	0	0	0

5. MODELE CINETIQUE

La cinétique de transformation de l'o-chlorotoluène en dichloro-méthyle-benzène, puis en benzotrithlorure par réaction avec le chlore est modélisée par une loi d'Arrhenius :

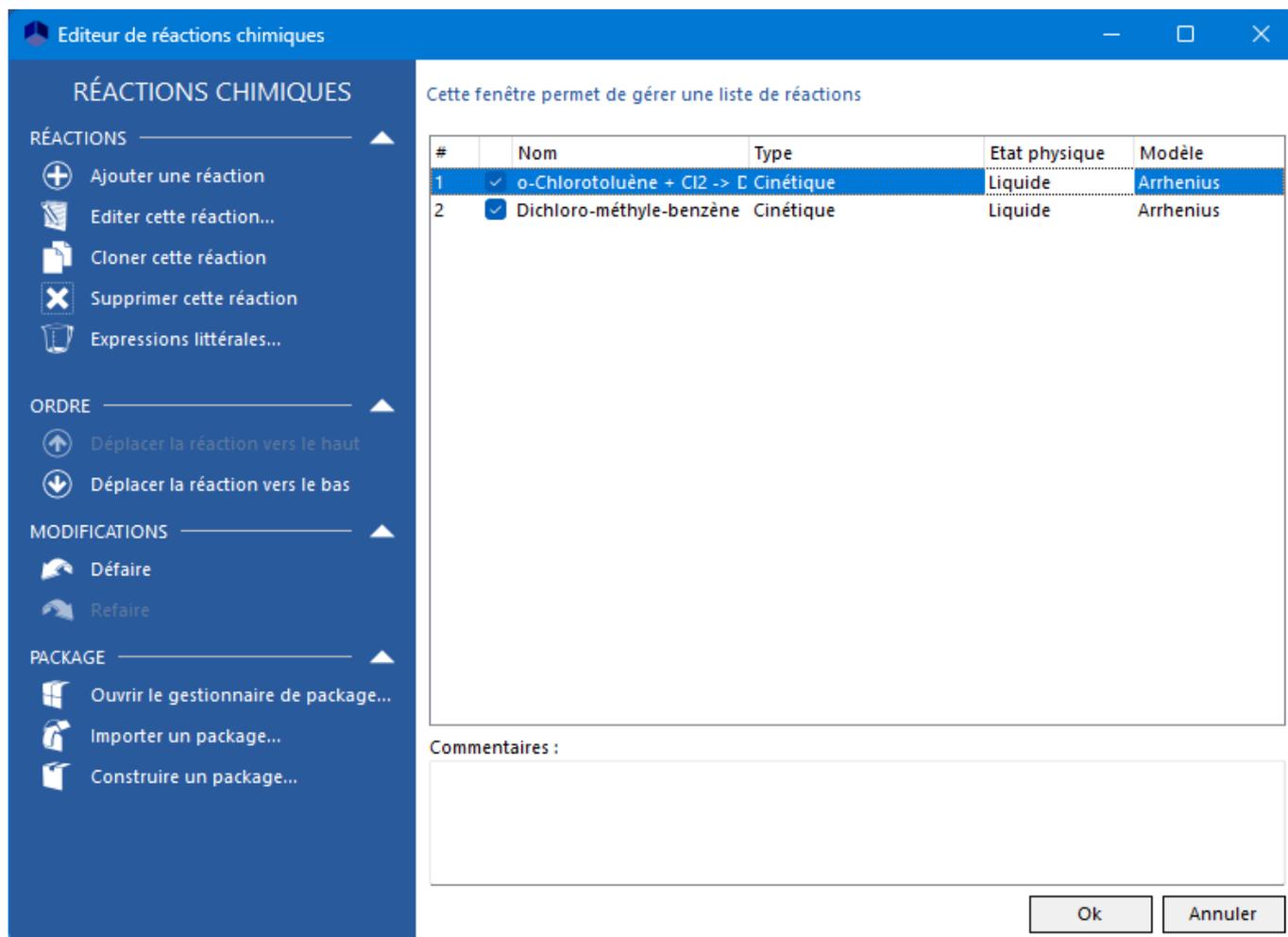
$$r_i = k_i \times \exp\left(\frac{-Ea_i}{RT}\right) \times C_{Ai} \times C_{Bi}$$

Les paramètres cinétiques de chaque réaction sont présentés dans le tableau ci-dessous :

Réaction	C_{Ai} (mol/l)	C_{Bi} (mol/l)	k_i (l/mol/s)	Ea_i (J/mol)
R1	o-chlorotoluène	Chlore	$2,7203e^{17}$	130 320
R2	Dichloro-méthyle-benzène	Chlore	580	42 200

6. IMPLEMENTATION DU MODELE CINETIQUE EN UTILISANT SIMULIS REACTIONS

Les réactions présentées dans les paragraphes 2 et 5 ont été décrites dans Simulis Reactions, comme illustré dans l'écran ci-dessous.



Ces réactions suivent la loi classique d'Arrhénius. Elles sont donc décrites dans l'interface standard de Simulis Reactions.

Toutes les réactions ont lieu en phase liquide.

La chaleur de réaction de chaque réaction est calculée à l'aide des enthalpies standards de formation.

7. SIMULATION

7.1. Description du procédé

7.1.1. Réacteur

Le réacteur utilisé pour la chloration de l'o-chlorotoluène est un réacteur fermé diphasique liquide-vapeur.

Caractéristiques du réacteur	
Volume	3 m ³
Ciel	Azote

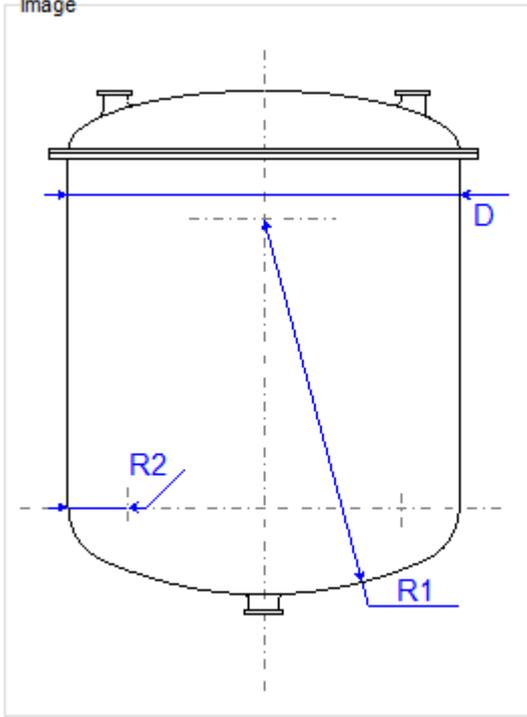
Les conditions initiales sont présentées ci-dessous :

Conditions initiales	
Température	25°C
Pression	1 atm
Charge initiale	
o-Chlorotoluène	2 400 kg

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

Géométrie du bas de cuve
✕

Image



Type de géométrie de fond de cuve

Torisphérique

Paramètres

Nombre de chicanes: 4

Diamètre de la cuve (D): 1400 mm

Hauteur du fond de la cuve (H): 0 m

Rayon de courbure n°1 (R1): 1400 mm

Rayon de courbure n°2 (R2): 140 mm

Référence / Note

Restaurer
Technologie
OK
Annuler

Le réacteur est en acier inoxydable. Le poids de la cuve est spécifié en raison de l'inertie thermique du matériau de la paroi qui sera pris en compte dans la simulation.

Matériaux de la paroi

Nombre de matériaux de la paroi

Matériau n° 1

Epaisseur

Masse

Côté PROCEDE

Côté UTILITE

Matériau n° 2

Epaisseur

Masse

Référence / Note

Restaurer Technologie

La conductivité thermique de l'acier inoxydable est considérée comme étant égale à 15,3 W/m/K et sa chaleur spécifique est prise égale à 500 J/kg/K. Ces données sont spécifiées pour chaque étape.

7.1.2. Dispositif de chauffage/refroidissement

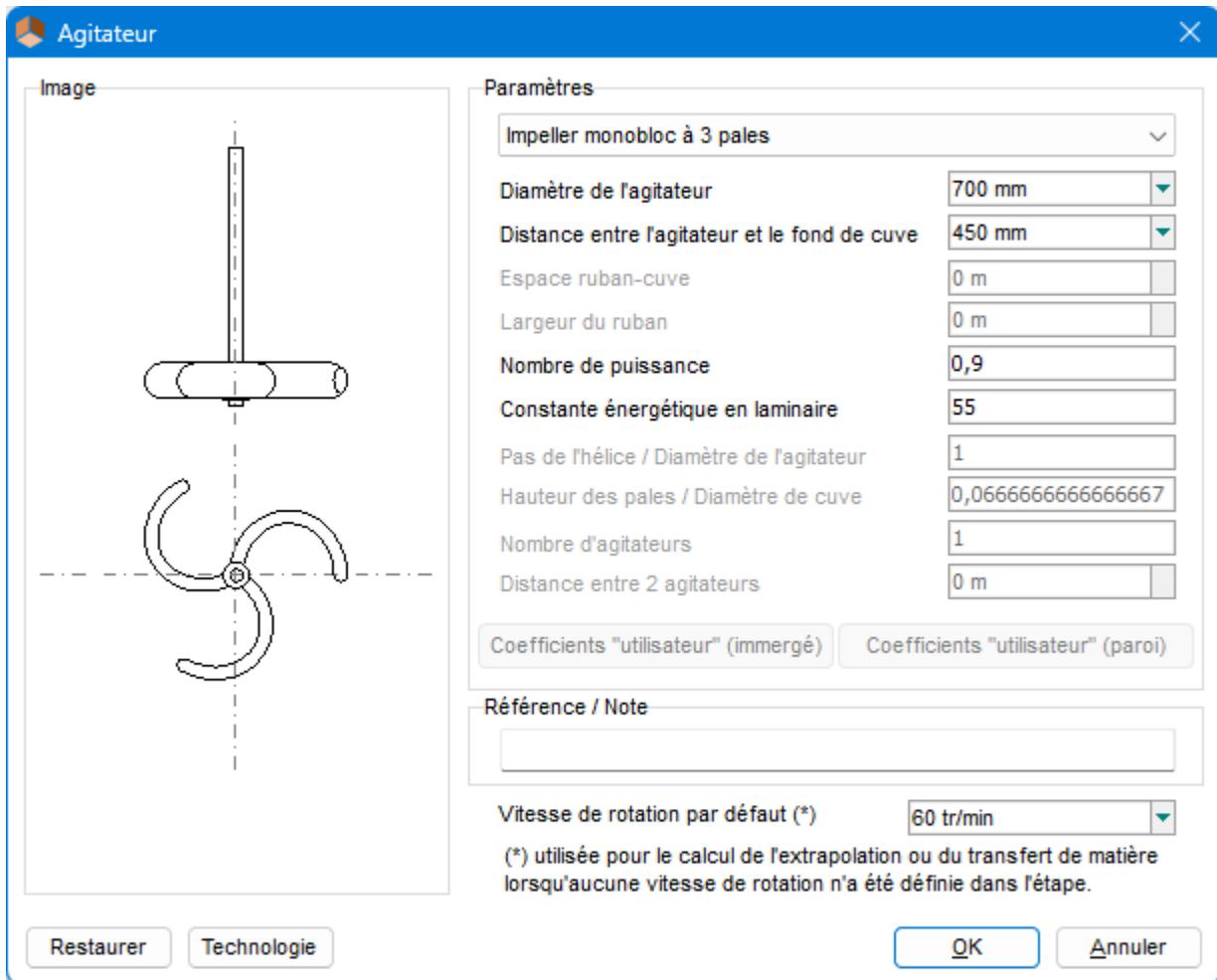
Les caractéristiques de l'échangeur de chaleur par la paroi utilisé dans cette simulation sont données ci-dessous :

Les fluides thermiques utilisés sont décrits dans le tableau suivant :

Première étape : fluide caloporteur	
Type	Vapeur saturée
Pression	6 bar abs.
Débit massique	200 kg/h
Deuxième étape : fluide de refroidissement	
Type	Eau
Température en entrée	25°C
Débit nominal	4 000 kg/h

7.1.3. Agitateur

Les caractéristiques de l'agitateur sont présentées dans l'écran ci-dessous. La vitesse de rotation est de 90 rpm pour chaque étape.



 Les valeurs figurant dans les champs **Nombre de puissance** et **Constante énergétique en laminaire** sont utilisées quand des calculs d'extrapolation sont effectués. Les valeurs affichées par défaut sont les valeurs habituelles pour des géométries standards pour chaque type de pales et pour une implémentation classique dans la cuve. Avant de lancer les calculs, l'adéquation entre ces valeurs et la taille/disposition réelle du système d'agitation doit être vérifiée.

 La vitesse de rotation par défaut est utilisée pour les calculs d'extrapolation ou de transfert de matière uniquement dans les étapes pour lesquelles cette valeur n'est pas spécifiée.

7.1.4. Condenseur

Dans cet exemple, un condenseur à 2 étages est utilisé. Les paramètres des deux étages sont donnés dans le tableau ci-dessous (ces paramètres sont identiques pour les deux étapes).

	1 ^{er} étage	2 ^{eme} étage
Type de calcul	A surface et coefficient d'échange fixés	
Coefficient d'échange (kcal/h/m ² /K)	300	
Aire d'échange (m ²)	15	0.5
Fluide utilisé		
Type	Eau	Autre
Température d'entrée (°C)	20	-15
Débit massique (kg/h)	3 000	100
Nombre de points de référence	-	1
Température de référence (°C)	-	-15
Puissance de chauffe (cal/g/K)	-	0,7933

7.1.5. Contrôleur PID

Les paramètres du PID utilisé pour contrôler la température du réacteur au cours de l'étape de réaction sont les suivants :

Spécification de température	
Température minimum	59°C
Température de consigne	62°C
Température maximum	65°C
Variable de régulation	
Type	Débit du fluide utilisé
Débit minimum	1 kg/h
Débit maximum	10 000 kg/h
Contrôleur	
Type de contrôle	Feedback
Gain	-5
Ti	500 s
Td	0 s
Temps d'échantillonnage	10 s
Vanne	
Type d'équation	Exponentielle
Cv	30

7.1.6. Alimentations

Un flux continu d'azote est alimenté tout au long de la simulation (c'est-à-dire pendant les deux étapes) :

Température	25°C
Pression	1 atm
Débit d'azote	1 kg/h

Un flux continu de chlore (réactif) est alimenté au cours de la seconde étape opératoire (étape de réaction) :

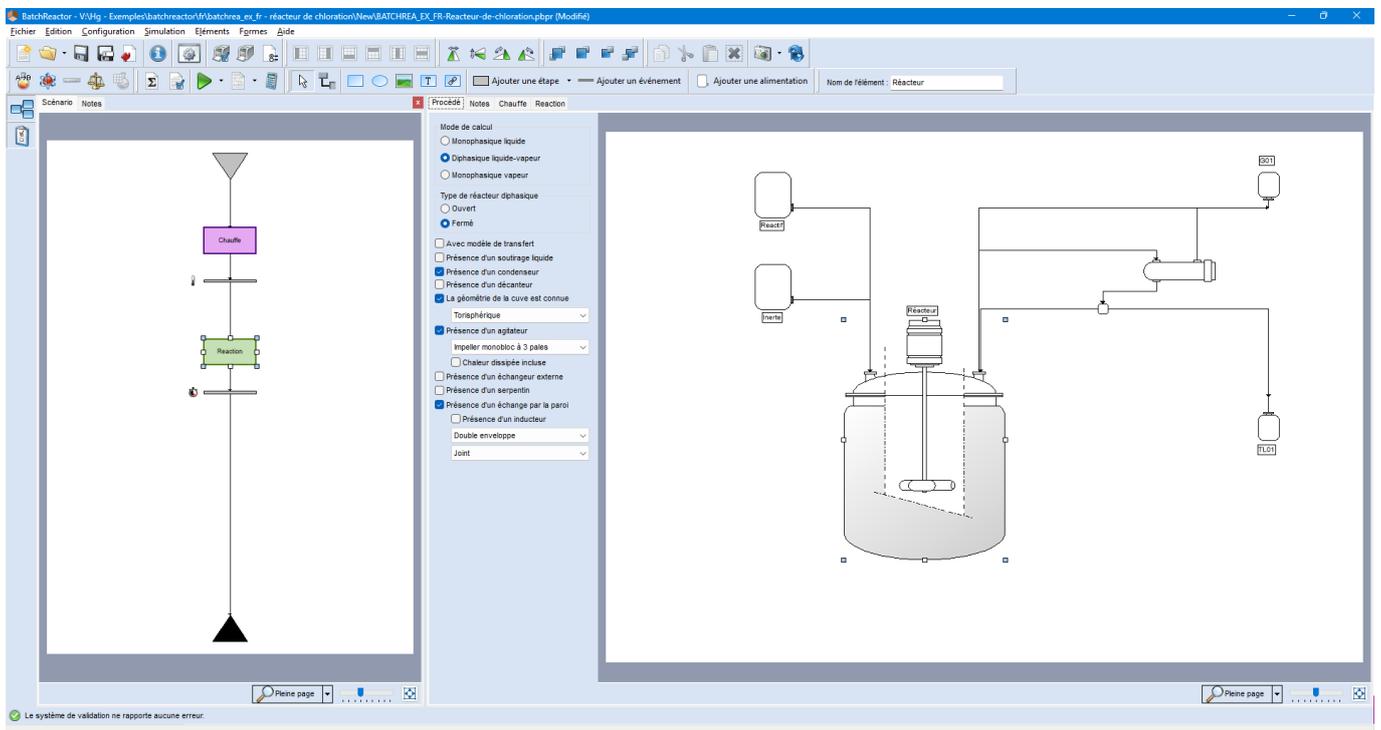
Température	25°C
Pression	3 bar abs.
Débit de chlore	60 kg/h

7.1.7. Mode opératoire

Le mode opératoire est constitué de deux étapes. Au cours de la première étape, la charge initiale est chauffée jusqu'à 58°C sous reflux total. Aucune réaction n'a lieu au cours de cette étape. Après cette étape, le réactif (chlore) est alimenté pendant 13 heures. Au cours de cette étape de réaction, la température dans le réacteur est contrôlée par un PID qui la maintient à 62°C (en agissant sur le débit du fluide utilité). Les paramètres de ces étapes sont résumés dans le tableau suivant :

Paramètre	Première étape : chauffe	Deuxième étape : réaction
Type	Flux thermique variable	Contrôle de la température du réacteur
Pression du réacteur	1 atm	
Taux de reflux	1	
Alimentation en azote	Ouvverte	
Alimentation en chlore	Fermée	Ouvverte
Évènement d'arrêt	58°C dans le réacteur	Temps écoulé depuis le début de l'étape (13 h de réaction)

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



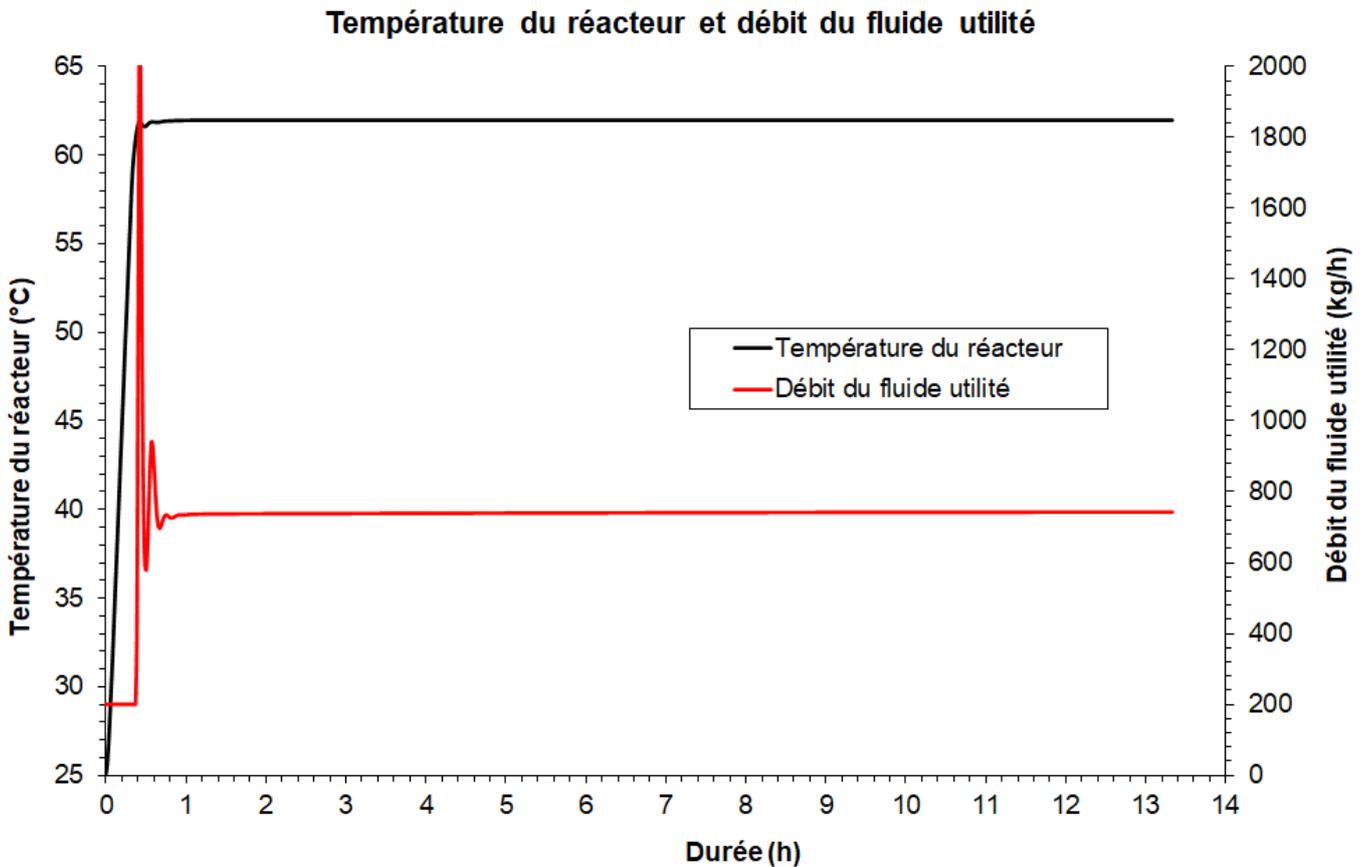
7.2. « Astuces »

Pour obtenir des profils plus lisses au cours de la première partie de l'étape de réaction, l'intervalle de temps entre chaque impression peut être réduit à 60 s (au lieu de la valeur par défaut fixée à 600 s), dans la fenêtre « Paramètres du rapport ».

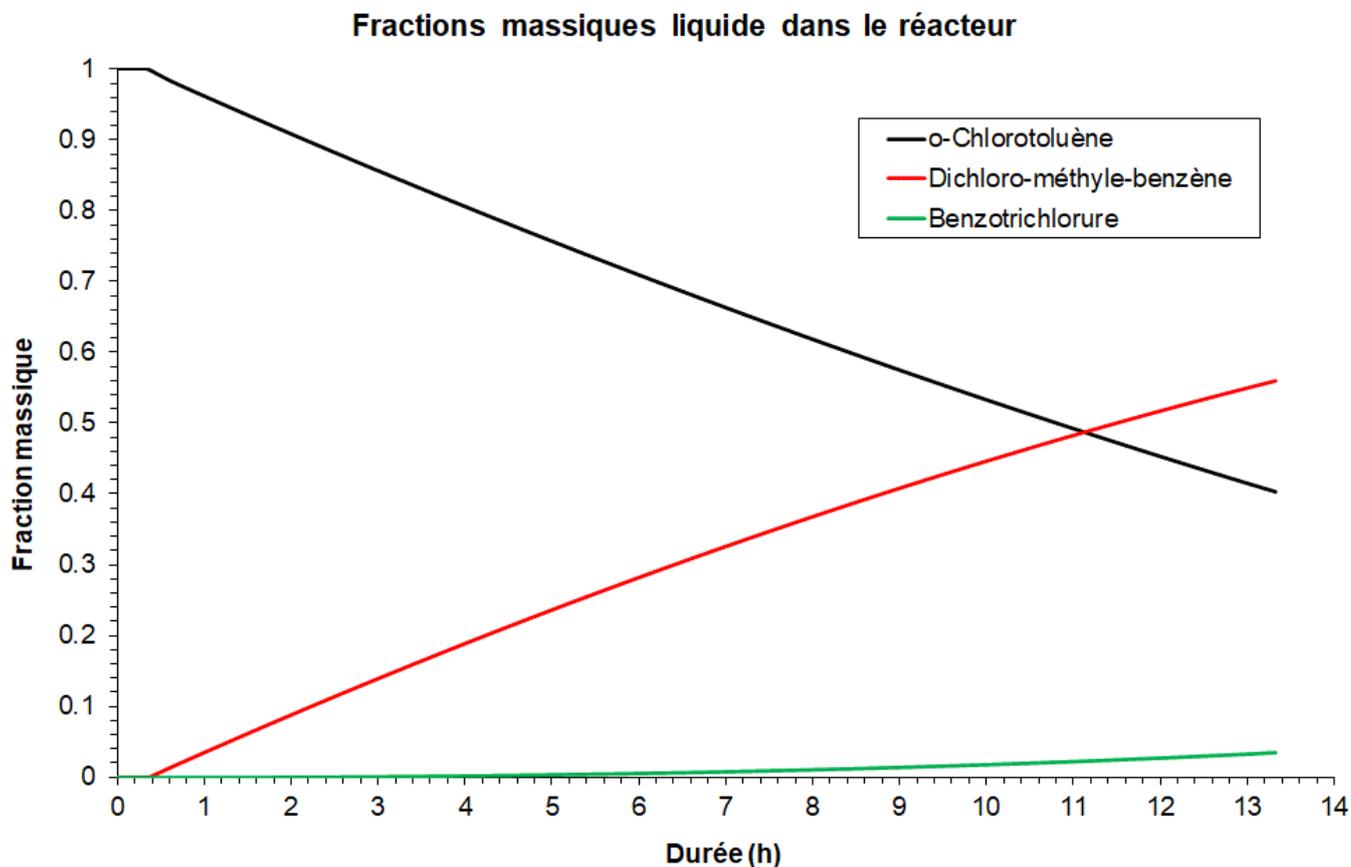
Dans un premier temps, pour analyser les effets du PID, la durée de l'étape de réaction peut être ramenée à 2 h au lieu de 13 h.

7.3. Résultats

La figure suivante montre l'évolution de la température du réacteur et du débit du fluide utilisé. Au cours de l'étape de chauffe, la température du réacteur augmente de façon quasiment linéaire depuis la température initiale (25°C) jusqu'à la température souhaitée (58°C). Au cours de cette étape, d'une durée de 19,5 min, le débit du fluide utilisé (vapeur) est maintenu constant. Au cours de l'étape de réaction, la régulation procède à un contrôle précis de la température du réacteur pour la maintenir à 62°C. Le débit du fluide utilisé (fluide défini par l'utilisateur) montre une grande variation au début de cette étape, en raison de l'action de la régulation pour contrôler la température du réacteur.

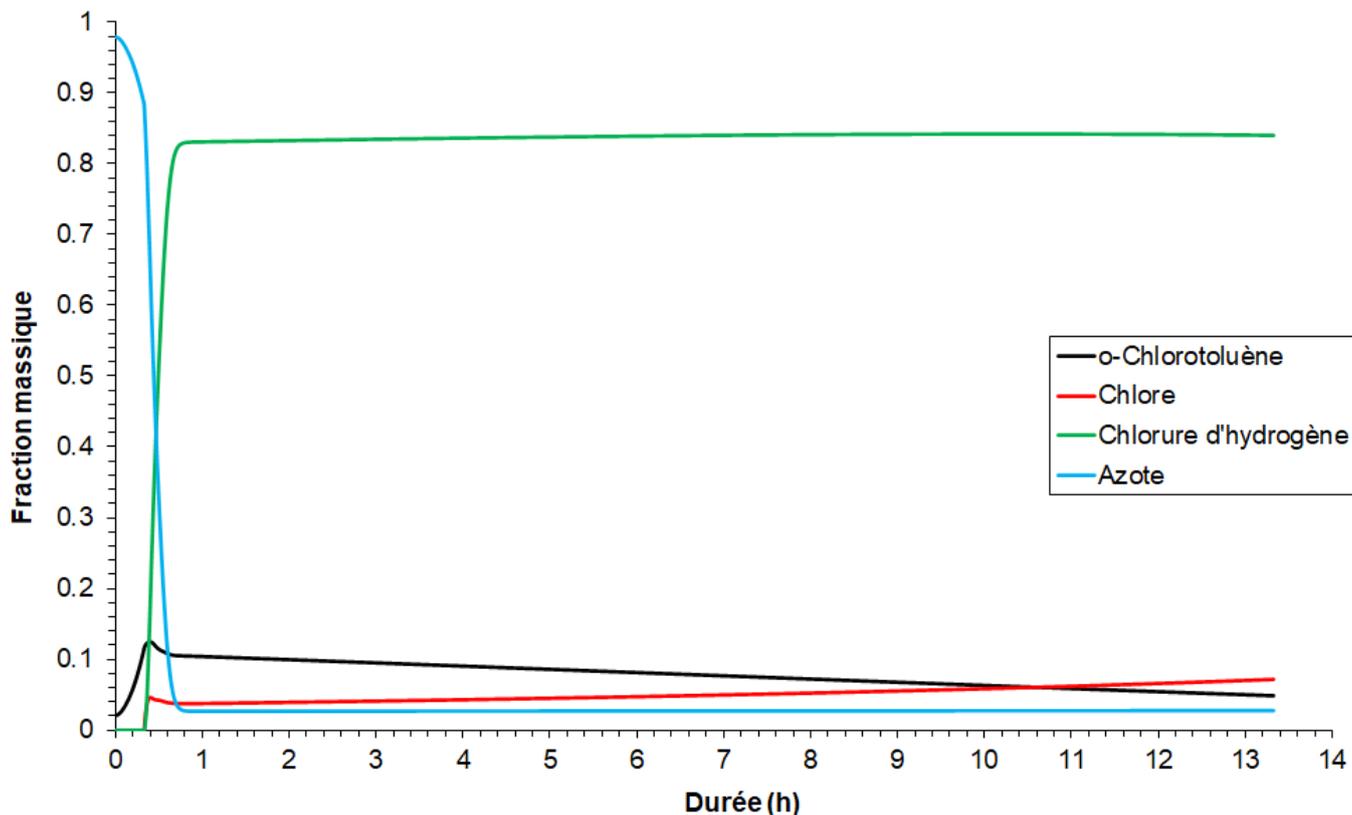


Après les 20 premières minutes de chauffe, la teneur en o-chlorotoluène diminue en raison de la chloration. Même si le dichloro-méthyle-benzène réagit pour donner du benzotrichlorure, pendant les 13 h de la réaction, la quantité de dichloro-méthyle-benzène produit est plus importante que celle de benzotrichlorure.



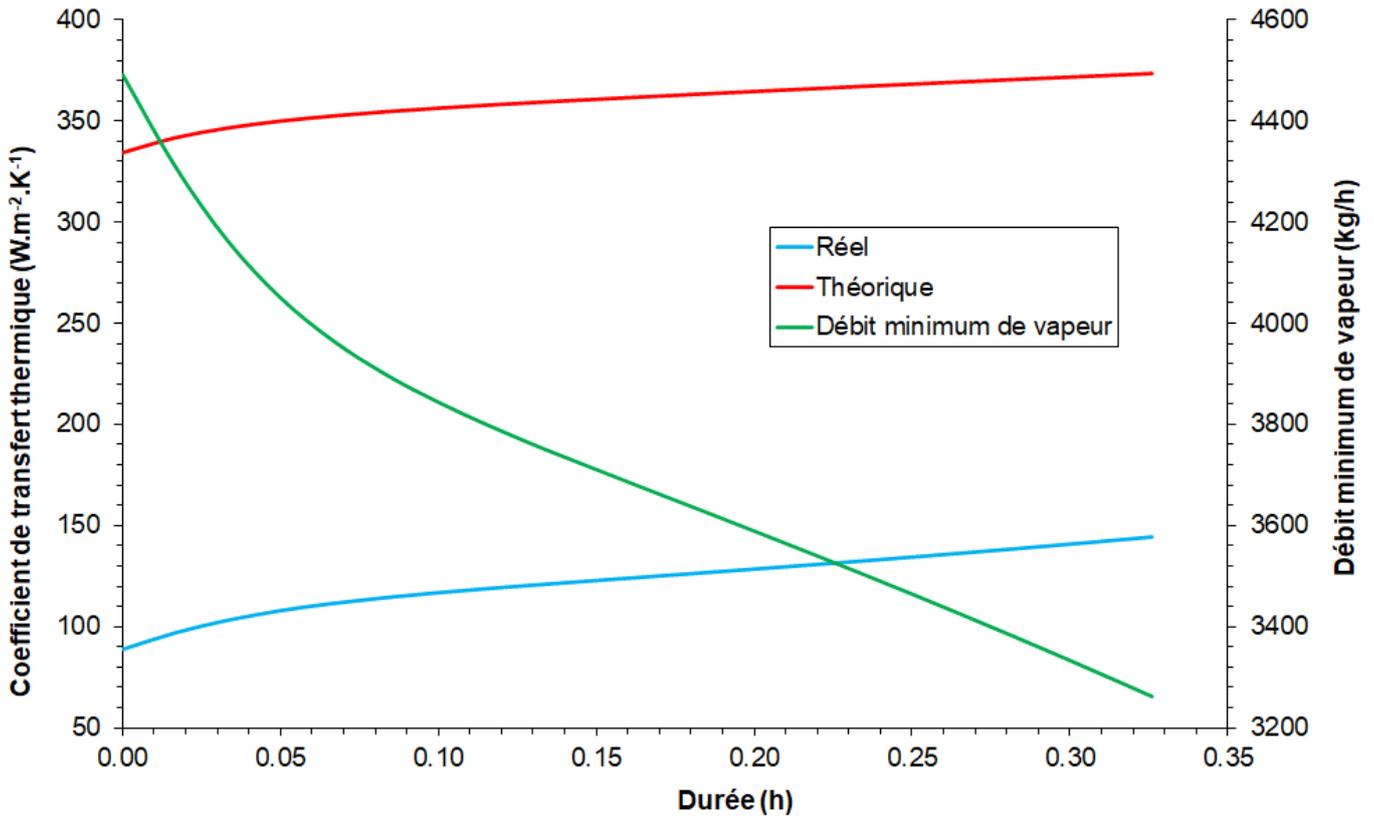
Au cours de l'étape de chauffe, l'azote présent dans le ciel gazeux du réacteur est progressivement remplacé par de l'o-chlorotoluène. Au cours de l'étape de réaction, le ciel du réacteur est principalement composé de chlorure d'hydrogène, le chlore, l'o-chlorotoluène et l'azote sont également présents mais en moindres quantités.

Fractions massiques dans le ciel



Le débit de vapeur minimum est le débit de vapeur requis pour procéder à un échange de chaleur utilisant uniquement la chaleur latente de vaporisation de la vapeur (*i.e.* pas de sous-refroidissement). Cette valeur est supérieure à celle qui est spécifiée (200kg/h). Le coefficient de transfert de chaleur « réel » est celui qui est utilisé dans les calculs. Le coefficient de transfert de chaleur « théorique » est celui correspondant à l'échange de chaleur en utilisant la plus petite valeur pour le débit de vapeur.

Paramètres de la vapeur pendant l'étape de chauffe



7.4. Extrapolation

L'objectif est de réaliser une extrapolation d'un facteur 3. Les paramètres utilisés sont les suivants :

Paramètres du rapport

Impression des compositions : Massique

Impression des débits : Massique

Intervalle de temps pour l'impression : 60 s

Nombre de pas d'intégration entre 2 points de suivi : 2

Variables suivies

- Fractions
- Concentrations
- Volume et débits
- Flux thermique et température

Calcul d'extrapolation

Type de facteur d'extrapolation : Volumique

Facteur d'extrapolation : 3

Génération du rapport (.docx)

Génération des fichiers constituants et réactions

Restaurer OK Annuler

Les techniques d'extrapolation d'un procédé se basent sur le principe de la similarité. Selon ce principe, les proportions entre un ou plusieurs paramètres doivent être les mêmes sur les deux échelles afin de reproduire les mêmes phénomènes et donc d'obtenir un produit final de même qualité. Pour une cuve agitée mécaniquement, 5 principes doivent être pris en compte :

- ✓ La similarité géométrique,
- ✓ La similarité cinétique,
- ✓ La similarité dynamique,
- ✓ La similarité thermique,
- ✓ la similarité chimique.

L'extrapolation d'un système d'agitation est basée sur le principe de la similarité géométrique, c'est-à-dire la conservation des proportions des dimensions entre l'installation pilote et l'implémentation à l'échelle industrielle.

$$k_{Linéaire} = \frac{T_{Industrielle}}{T_{Pilote}} = \frac{D_{Industriel}}{D_{Pilote}} = \dots$$

Dans la mesure du possible, le même type d'agitateur ainsi que la même géométrie seront utilisés. La similarité géométrique permet que les caractéristiques de l'agitateur (par exemple le nombre de puissance) soient identiques sur les deux échelles.

Cependant, la modification du volume de la cuve entraîne la modification du rapport volume/surface. La surface de la cuve augmente moins que le volume. Dans cet exemple, le volume est multiplié par un facteur 3, mais la surface par un facteur 2. Cela peut représenter un problème pour l'échange de chaleur, s'il s'agit d'un échange de chaleur par la paroi comme dans cet exemple (double enveloppe). Il arrive que la similarité géométrique ne soit plus respectée dans des cas comme celui-ci.

BatchReactor peut être utilisé pour simuler la nouvelle échelle et adapter, si nécessaire, le dispositif de transfert de chaleur pour garantir les résultats (par exemple, épaisseur de l'enveloppe, double-enveloppe, buses d'agitation...)

Avec un facteur d'extrapolation de 3 pour le volume, BatchReactor a calculé le facteur d'échelle linéaire suivant : 1,44. Le tableau suivant (disponible dans les résultats de BatchReactor) présente la taille de la nouvelle cuve.

Extrapolation de la cuve		
	Simulation	Extrapolation
Géométrie du bas de cuve	Torisphérique	
Diamètre de la cuve (m)	1.40	2.02
Rayon de courbure 1 (m)	1.40	2.02
Rayon de courbure 2 (m)	0.14	0.20
Nombre de chicanes (m)	4	
Hauteur de liquide maximum (m)	1.68	2.43
Volume de liquide maximum (m)	2.45	7.34
Extrapolation du système d'agitation		
	Simulation	Extrapolation
Mobile d'agitation	Impeller monobloc à trois pales (acier)	
Diamètre (m)	0.70	1.01
Hauteur du mobile d'agitation (m)	0.45	0.65

L'impossibilité de procéder à une extrapolation respectant la similarité dynamique impose de choisir un nombre sans dimension dont l'influence est prépondérante dans le phénomène étudié et qui sera maintenu constant : c'est l'invariant. Le choix de cet invariant se fait grâce à la connaissance approfondie du procédé. Les tests pilotes sont dans ce cas très importants. Maintenir un invariant stable entre les deux échelles (pilote et industrielle) permet aux paramètres du procédé de varier en fonction d'un facteur multiplicatif lié au facteur k d'extrapolation. Les principaux invariants et les caractéristiques principales dans BatchReactor sont par exemple la vitesse périphérique, le nombre de Reynolds, la puissance volumique...

Il est à noter que la constante énergétique en régime laminaire a été calculée pour un fluide newtonien.

Le tableau suivant (fourni par BatchReactor) donne cette information pour la simulation étudiée (extrapolation par un facteur 3 sur le volume). À titre d'exemple, si la vitesse de rotation était maintenue constante d'une échelle à l'autre, la puissance de l'écoulement turbulent aurait été multipliée par un facteur 6.

Facteurs multiplicatifs affectant les grandeurs caractéristiques suivant les invariants

Invariant	Constante	Vitesse de rotation	Vitesse périphérique	Nombre de Reynolds	Nombre de Froude	Nombre de Weber	Nombre de Froude volumique	Puissance Laminaire	Puissance Turbulent	Corrélation de Zwistering	Règle d'usage
Vitesse de rotation	N	1.4	2.1	1.4	3.0	1.0	2.1	3.0	6.2	1.4	1.3
Vitesse périphérique	ND	0.69	1.4	0.69	1.4	0.48	0.69	1.4	2.1	0.95	0.93
Nombre de Reynolds	ND-2	0.48	0.69	0.33	0.69	0.23	0.23	0.69	0.69	0.66	0.64
Nombre de Froude	N-2D	0.83	1.2	1.7	2.1	0.69	1.2	2.1	3.6	1.1	1.1
Nombre de Weber	N-2D-3	0.58	0.83	1.2	0.48	0.33	0.40	1.0	1.2	0.79	0.77
P/V laminaire	N	1.0	1.4	2.1	1.4	3.0		3.0		1.4	1.3
P/V turbulent	N-3D-2	0.78	1.1	1.6	0.89	1.8			3.0	1.1	1.1
Puissance laminaire	N-2D-3	0.58	0.83	1.2	0.48	1.0	0.33			0.79	0.77
Puissance turbulent	N-3D-5	0.54	0.78	1.1	0.43	0.89	0.33			0.74	0.73
Corrélation Zwistering	ND-0.85	0.73	1.1	1.5	0.77	1.6	0.54	0.82	1.6	2.5	0.98
Règle d'usage	ND-0.8	0.75	1.1	1.6	0.80	1.7	0.56	0.86	1.7	2.6	1.0

Pour chaque étape, BatchReactor indique le nombre de Reynolds et le régime d'écoulement correspondant : turbulent dans les deux étapes avec un nombre de Reynolds situé autour de 10^6 .

Pour chaque étape, un tableau similaire est disponible. À ce niveau, la valeur de chaque invariant (vitesse de rotation, vitesse périphérique, puissance volumique...) apparaît. Le tableau ci-dessous correspond à l'étape de chauffe de cet exemple. À savoir :

- ✓ Vitesse périphérique aux alentours de 3,3 m/s (valeur comprise dans les valeurs habituelles pour ce type de mobile d'agitation (agitateur radial).
- ✓ La puissance volumique est aux alentours de 240 W/m^3 (niveau modéré). Ce niveau est habituel pour une opération d'échange de chaleur et de dispersion du gaz dans une cuve agitée et donc cohérent avec l'application étudiée dans cet exemple.

Dans le même tableau, les valeurs atteintes par les paramètres en fonction de l'invariant choisi sont affichées. La puissance volumique est l'un des invariants qui peut être choisi dans le cas d'une réaction gaz-liquide. Sur le tableau suivant, on peut voir que si cet invariant est maintenu constant, alors :

- ✓ La vitesse périphérique augmente légèrement (3,7 m/s au lieu de 3,3 m/s) et reste dans un niveau habituel pour ce type de mobile d'agitation.
- ✓ Le régime de la cuve est toujours turbulent (nombre de Reynolds aux alentours de $1,5 \times 10^6$).
- ✓ La puissance nécessaire pour l'agitateur est multipliée par un facteur 3 : 1,6 kW au lieu de 0,54 kW, ce qui semble être une puissance acceptable.

À noter que si aucune chicane n'est spécifiée, BatchReactor calcule la profondeur du vortex pour la simulation et pour les cas d'extrapolation correspondant à chaque invariant.

Valeur des grandeurs caractéristiques à l'échelle industrielle en fonction des invariants											
Invariant	Unité	Simulation	Vitesse de rotation (rpm)	Vitesse périphérique (m/s)	Nombre de Reynolds (-)	Nombre de Froude (-)	Nombre de Weber (-)	Puissance volumique (W/m3)	Puissance (kW)	Corrélation de Zwietering (m ^{0.85} /s)	Règle d'usage (m ^{0.85} /s)
Vitesse de rotation	(rpm)	90.		4.8 (correcte)	2.42E+06	0.23	8.43E+04	4.85E+02 (modérée)	3.5	1.5	1.5
Vitesse périphérique	(m/s)	3.3 (correcte)	62.		1.68E+06	0.11	4.05E+04	1.62E+02 (faible)	1.2	1.0	1.0
Nombre de Reynolds	(-)	1.16E+06	43.	2.3 (faible)		5.35E-02	1.95E+04	54. (faible)	0.38	0.73	0.73
Nombre de Froude	(-)	0.16	75.	4.0 (correcte)	2.02E+06		5.85E+04	2.80E+02 (modérée)	2.0	1.3	1.3
Nombre de Weber	(-)	2.81E+04	52.	2.7 (faible)	1.40E+06	7.72E-02		93. (faible)	0.67	0.87	0.87
Puissance volumique	(W/m3)	2.33E+02 (modérée)	71.	3.7 (correcte)	1.90E+06	0.14	5.17E+04		1.7	1.2	1.2
Puissance	(kW)	0.56	49.	2.3 (faible)	1.32E+06	6.83E-02	2.49E+04	70. (faible)		0.82	0.82
Corrélation Zwietering	(m ^{0.85} /s)	1.1	66.	3.5 (correcte)	1.77E+06	0.12	4.52E+04	1.90E+02 (faible)	1.4		1.1
Règle d'usage	(m ^{0.8} /s)	1.1	67.	3.5 (correcte)	1.81E+06	0.13	4.69E+04	2.01E+02 (modérée)	1.4	1.1	

BatchReactor fournit également des indications sur l'extrapolation des alimentations gaz. Deux d'entre elles figurent dans cet exemple : une pour le gaz inerte (azote) et une autre pour le réactif (chlore). Pour les alimentations gaz, deux critères d'extrapolation sont généralement pris en compte : la vitesse superficielle et la vvm (débit de gaz par volume de liquide). Ce dernier critère est habituellement utilisé pour l'extrapolation d'une réaction gaz-liquide. Le tableau suivant présente les résultats pour l'alimentation en réactif dans l'étape de réaction. L'extrapolation à vitesse superficielle constante induit un nouveau débit de gaz légèrement inférieur à celui obtenu par l'extrapolation à vvm constante.

L'extrapolation du disperseur de gaz doit également être maniée avec précaution, notamment en ce qui concerne l'emplacement du disperseur de gaz par rapport à l'agitateur, au fond et à la paroi de la cuve, ainsi que le nombre de trous et leur diamètre.

Une fois que le nouveau débit de gaz est choisi, il peut être intéressant de vérifier si la dispersion du gaz est toujours dans le régime de chargement ou de dispersion complète pour assurer une bonne répartition du gaz dans la cuve et un bon fonctionnement de l'agitateur. Il peut également être intéressant d'analyser l'évolution de la puissance consommée lors de l'injection du gaz dans la cuve. Une baisse importante de la puissance lors de la présence du gaz dans la cuve peut indiquer un engorgement de l'agitateur.

	Unité	Simulation	Extrapolation à	
			us constante	vvm constant
Débit de gaz	(m3/h)	7.0	15.	21.
Vitesse superficielle (us)	(m/s)	1.26E-03		1.82E-03
Débit vvm (vvm)	(1/min)	4.89E-02	3.39E-02	

Pour plus d'information sur l'extrapolation, se référer à [XUE06], [KRE16].

8. BIBLIOGRAPHIE

- [KRE16] KRESTA S.M., ETCHELLS III A.W., DICKEY D.S., ATIEMO-OBENG V.A., "Advances in Industrial Mixing, a Companion to the Handbook of Industrial Mixing", Wiley (2016)
- [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)
- [XUE06] XUEREB C., POUX M., BERTRAND J., "Agitation et mélange, aspects fondamentaux et applications industrielles", Dunod (2006)

9. NOMENCLATURE

C_{Ai}	Concentration du constituant A pour la réaction i	mol/l
C_{Bi}	Concentration du constituant B pour la réaction i	mol/l
D	Diamètre de l'agitateur	m
Ea_i	Énergie d'activation de la réaction Ri	J/mol
K	Facteur d'extrapolation	(-)
k_i	Facteur pré-exponentiel de la réaction Ri	l/(mol.s)
R	Constante des gaz parfaits	J/(mol.K)
r_i	Vitesse de la réaction i	mol/(l.s)
t	Température	K
T	Diamètre de la cuve	m

Indice

<i>Industrielle</i>	Relatif à la mise à l'échelle industrielle
<i>Linéaire</i>	Relatif à la longueur en 2D
<i>Pilote</i>	Relatif à l'échelle pilote