

EXEMPLE D'APPLICATION BATCHREACTOR

INDUSTRIE AGROALIMENTAIRE

OXYDATION BATCH DE LA SAUCE TOMATE

INTERET DE L'EXEMPLE

Ce document illustre la modélisation d'un bioréacteur, en tenant compte des cinétiques de bioréaction et de la résistance au transfert de matière en phase liquide.

Cet exemple, pris dans le domaine de la transformation alimentaire, traite des réactions de certains constituants de la sauce tomate lors de la fabrication du produit, tels que l'acide ascorbique, l'acide chlorogénique et le β -carotène. Les réactions étudiées concernent l'oxydation et la dégradation de l'acide ascorbique, l'oxydation de l'acide chlorogénique et l'isomérisation du β -carotène.

Les cinétiques de bioréaction sont modélisées à l'aide du mode avancé de Simulis Reactions, serveur de réactions chimiques utilisé dans BatchReactor. Cette fonctionnalité permet à l'utilisateur de coder des modèles mathématiques personnalisés ne faisant pas partie des bibliothèques standard de modèles cinétiques.

Le transfert d'oxygène en phase liquide est une étape essentielle, ayant une influence importante sur le rendement des réactions d'oxydation. Par conséquent, l'option « modèle de transfert » est sélectionnée et permet de prendre en compte la résistance au transfert de matière, et donc de calculer rigoureusement la concentration d'oxygène en phase liquide.

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

FICHIERS BATCHREACTOR CORRESPONDANTS	<p><i>BATCHREA_EX_FR – Sauce tomate Essai 050C.pbpr</i></p> <p><i>BATCHREA_EX_FR - Sauce tomate Essai 070C.pbpr</i></p> <p><i>BATCHREA_EX_FR - Sauce tomate Essai 095C.pbpr</i></p> <p><i>BATCHREA_EX_FR - Sauce tomate Essai 105C.pbpr</i></p>
---	---

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.....	5
4.	MODELE THERMODYNAMIQUE	7
5.	MODELE DE TRANSFERT DE MATIERE.....	8
	5.1. Description du modèle	8
	5.2. Configuration du modèle de transfert dans BatchReactor	9
6.	MODELE CINETIQUE.....	10
	6.1. Description du modèle	10
	6.2. Implémentation du modèle cinétique en utilisant Simulis Reactions	11
7.	SIMULATION	18
	7.1. Description du procédé	18
	7.2. Résultats	20
8.	BIBLIOGRAPHIE	22
9.	NOMENCLATURE	22

1. INTRODUCTION

Cet exemple présente l'étude des réactions qui interviennent lors de la production de la sauce tomate au cours de la transformation des tomates fraîches en sauce concentrée.

Quatre réactions principales sont étudiées :

- l'oxydation de l'acide ascorbique
- la dégradation de l'acide ascorbique
- l'oxydation de l'acide chlorogénique
- l'isomérisation du β -carotène

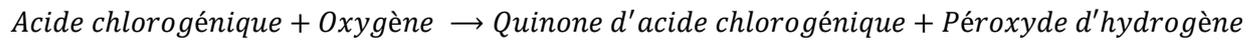
En ce qui concerne les phénomènes d'oxydation, l'acide ascorbique réagit en contact avec l'oxygène pour donner de l'acide déhydroascorbique et du peroxyde d'hydrogène, tandis que l'acide chlorogénique réagit avec l'oxygène pour donner de la quinone ainsi que du peroxyde d'hydrogène. Ces deux réactions étant limitées par le transfert d'oxygène dans la phase liquide où elles ont lieu, la résistance au transfert de matière est prise en compte dans le modèle. Dans le processus d'isomérisation, le réactif est le E-carotène (trans-isomère) qui devient le Z-carotène (cis-isomère). Enfin, en ce qui concerne la dégradation de l'acide ascorbique, il est considéré qu'une molécule de ce constituant donne une molécule d'acide ascorbique dégradé.

Toutes ces réactions suivent la loi d'Arrhenius, les valeurs de l'énergie d'activation et du facteur exponentiel provenant de [BRA12]. Il est à noter que les paramètres de ces lois d'Arrhenius dépendent de la plage de température.

2. MECANISME REACTIONNEL

Le mécanisme réactionnel pris en compte au cours de la transformation de tomates fraîches en sauce concentrée est le suivant :

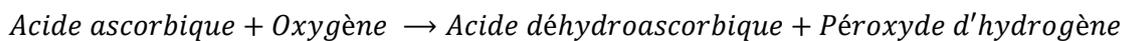
- ✓ Oxydation de l'acide chlorogénique :



soit :



- ✓ Oxydation de l'acide ascorbique



soit :



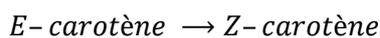
- ✓ Dégradation thermique de l'acide ascorbique :



soit :



- ✓ Isomérisation du β -carotène



soit :



3. CONSTITUANTS

Les constituants pris en compte dans les simulations figurent dans le tableau ci-dessous :

Nom	Numéro CAS ¹
Oxygène (*)	7782-44-7
Azote (*)	7727-37-9
Eau (*)	7732-18-5
Peroxyde d'hydrogène (*)	7722-84-1
Acide ascorbique (*)	50-81-7
Acide ascorbique dégradé (*)	
Acide déhydroascorbique	
Acide chlorogénique	
Quinone d'acide chlorogénique	
E-carotène	
Z-carotène	
Matière sèche	

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 physico-chimiques stockées dans cette base de données sont issues de la base DIPPR [ROW21].

Pour les constituants « oxygène » et « azote », les paramètres de la corrélation de pression de vapeur saturante ont été remplacés par les paramètres de la loi de Henry de ces constituants dans l'eau. Cette dernière permet de mieux représenter la solubilité de ces gaz en phase liquide.

$$\ln(P^0) = A + \frac{B}{T} + C \times \ln(T) + D \times T^E \quad (\text{Equation 101})$$

Coefficient	Oxygène	Azote
T _{min}	273 K	63.15 K
T _{max}	617 K	600 K
A	151.011089	152.79
B	-6889.6	-6921.99
C	-18.554	-18.7292
D, E	0	0

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

Le constituant « acide ascorbique dégradé » est un clone du constituant « acide ascorbique », seul le numéro CAS¹ a été modifié (numéro arbitraire).

Les autres constituants (acide déhydroascorbique, acide chlorogénique, quinone d'acide chlorogénique, E-carotène, Z-carotène et matière sèche) ont été créés en utilisant la fonction « Créer un nouveau constituant » dans Simulis Thermodynamics. Leurs propriétés sont les suivantes :

- | | |
|--|---------------------------------------|
| ✓ Numéro CAS ¹ | : Numéro arbitraire |
| ✓ Formule chimique | : Extraite de la documentation |
| ✓ Masse molaire | : Extraite de la documentation |
| ✓ Enthalpie de formation du gaz parfait à 25°C | : 0 J/mol |
| ✓ Chaleurs spécifiques massiques vapeur et liquide | : Identiques à celle de l'eau |
| ✓ Pression de vapeur saturante | : Choisie pour éviter la vaporisation |

$$\ln(P^0) = -30 \quad (\text{Equation 101})$$

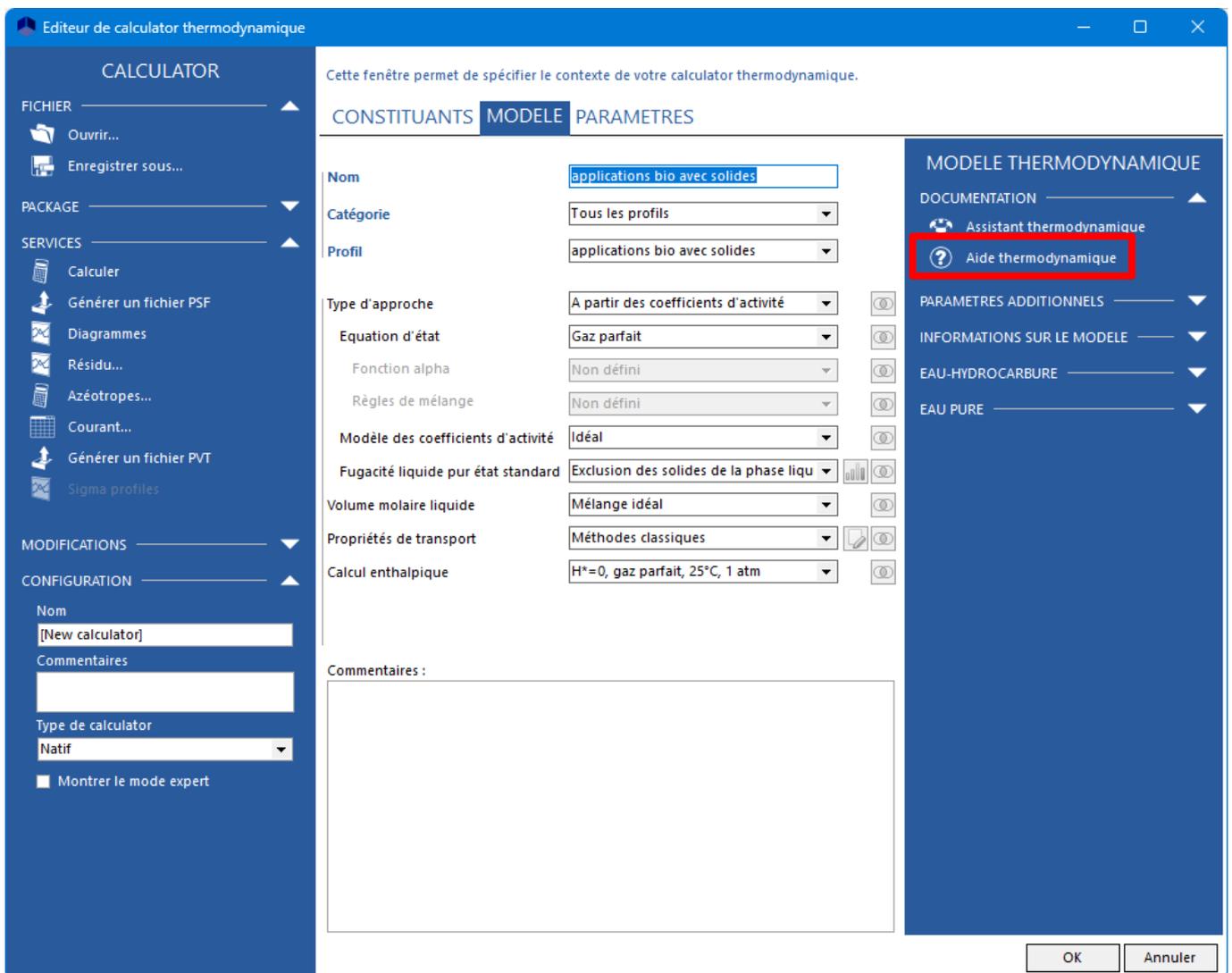
- | | |
|-----------------------------|------------------------------|
| ✓ Enthalpie de vaporisation | : 0 J/mol |
| ✓ Masse volumique liquide | : Identique à celle de l'eau |

Toutes les données expérimentales étant relatives à la quantité de matière sèche dans le système, le constituant « matière sèche » a été créé. Une masse molaire de 1 g/mol est adoptée. Ce constituant est considéré comme étant un solide insoluble.

4. MODELE THERMODYNAMIQUE

Les réactions se produisent à une température allant jusqu'à 105°C et à pression atmosphérique, la phase gaz est supposée suivre la loi des gaz parfaits.

La phase liquide contient un solide insoluble, la matière sèche. Ce solide a été représenté par un liquide non-volatile (voir § 3) qui doit être exclu de la phase liquide pour les calculs d'équilibre liquide-vapeur. En effet, dans le cas contraire il modifierait les compositions réelles de la phase liquide, et donc les constantes d'équilibre liquide-vapeur des constituants volatils. Ainsi, le profil thermodynamique « Applications bio avec solides » a été sélectionné, dans lequel le modèle « Exclusion des solides de la phase liquide » est défini pour calculer les fugacités en phase liquide. Pour plus d'informations, se reporter à l'aide thermodynamique accessible notamment depuis l'onglet « Modèle » de l'éditeur de calculator thermodynamique.



5. MODELE DE TRANSFERT DE MATIERE

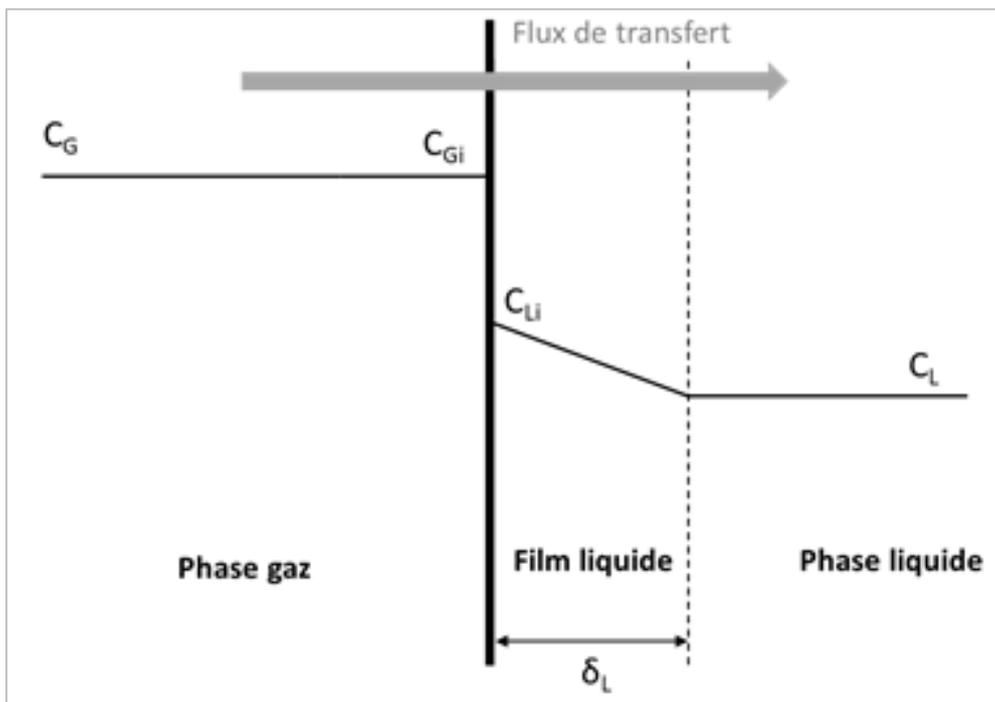
5.1. Description du modèle

Le modèle de transfert est activé afin de tenir compte de la résistance au transfert de matière de l'oxygène en phase liquide. Ce modèle s'appuie sur la théorie du double film : il existe de part et d'autre de l'interface gaz - liquide un film au niveau duquel le transfert de matière est régi par la diffusion. En émettant l'hypothèse que la résistance au transfert est localisée dans la phase liquide, la phase gaz est considérée à l'équilibre thermodynamique avec le film liquide, et le flux de transfert de matière est calculé à partir de la connaissance des coefficients de transfert de matière ($k_L a$) en phase liquide :

$$\Phi = k_L a (C_{Li} - C_L)$$

Avec :

Φ	Flux de transfert de matière	mol/(L.h)
$k_L a$	Coefficient volumique de transfert de matière en phase liquide	h^{-1}
C	Concentration molaire	mol/L



Les coefficients de transfert de matière de l'oxygène dans la phase liquide ont été estimés [BRA12] :

Température	$k_L a$
50°C	15,6 h^{-1}
70°C	38,4 h^{-1}
95°C	105,6 h^{-1}
105°C	151,8 h^{-1}

5.2. Configuration du modèle de transfert dans BatchReactor

L'option « Avec modèle de transfert » est sélectionnée dans le panneau de contrôle. Les paramètres du modèle de transfert sont renseignés de la façon suivante au niveau de la fenêtre « Procédé » :

Constituant	Modèle	Valeur
E-CAROTENE	Pas de résistance	
Z-CAROTENE	Pas de résistance	
DRY MATTER	Pas de résistance	
OXYGEN	Fourni	15.6 1/h
NITROGEN	Pas de résistance	

Phase gaz considérée pour le transfert de matière

Ciel gazeux

Gaz dispersé

% volumique : Négligeable

Renseigner ici la valeur du k_{La}
(dépend de la température opératoire)

La phase « gaz dispersé » (correspondant aux bulles de gaz dispersées dans la phase liquide) est considérée pour le transfert de matière. Plus d'informations sont disponibles dans le fichier d'aide (accessible en appuyant sur « F1 » depuis la fenêtre de configuration du modèle de transfert).

6. MODELE CINETIQUE

6.1. Description du modèle

[BRA12] a développé un modèle mathématique pour les réactions se produisant au cours de la production de sauce tomate (transformation de tomates fraîches en sauce concentrée).

✓ Vitesse d'oxydation de l'acide chlorogénique :

$$r_{ACHL} = k_{ACHL}^0 \times \exp\left(\frac{-Ea_{ACHL}}{RT}\right) \times [ACHL] \quad (R1)$$

✓ Vitesse d'oxydation de l'acide ascorbique :

$$r_{AASC} = k_{AASC}^0 \times \exp\left(\frac{-Ea_{AASC}}{RT}\right) \times [AASC] \times [O_2] \quad (R2)$$

✓ Vitesse de dégradation de l'acide ascorbique :

$$r_{AASC(dégrad.)} = k_{AASC(dégrad.)}^0 \times \exp\left(\frac{-A_{AASC(dégrad.)}}{T}\right) \times [AASC] \quad (R3)$$

✓ Vitesse d'isomérisation du β -carotène :

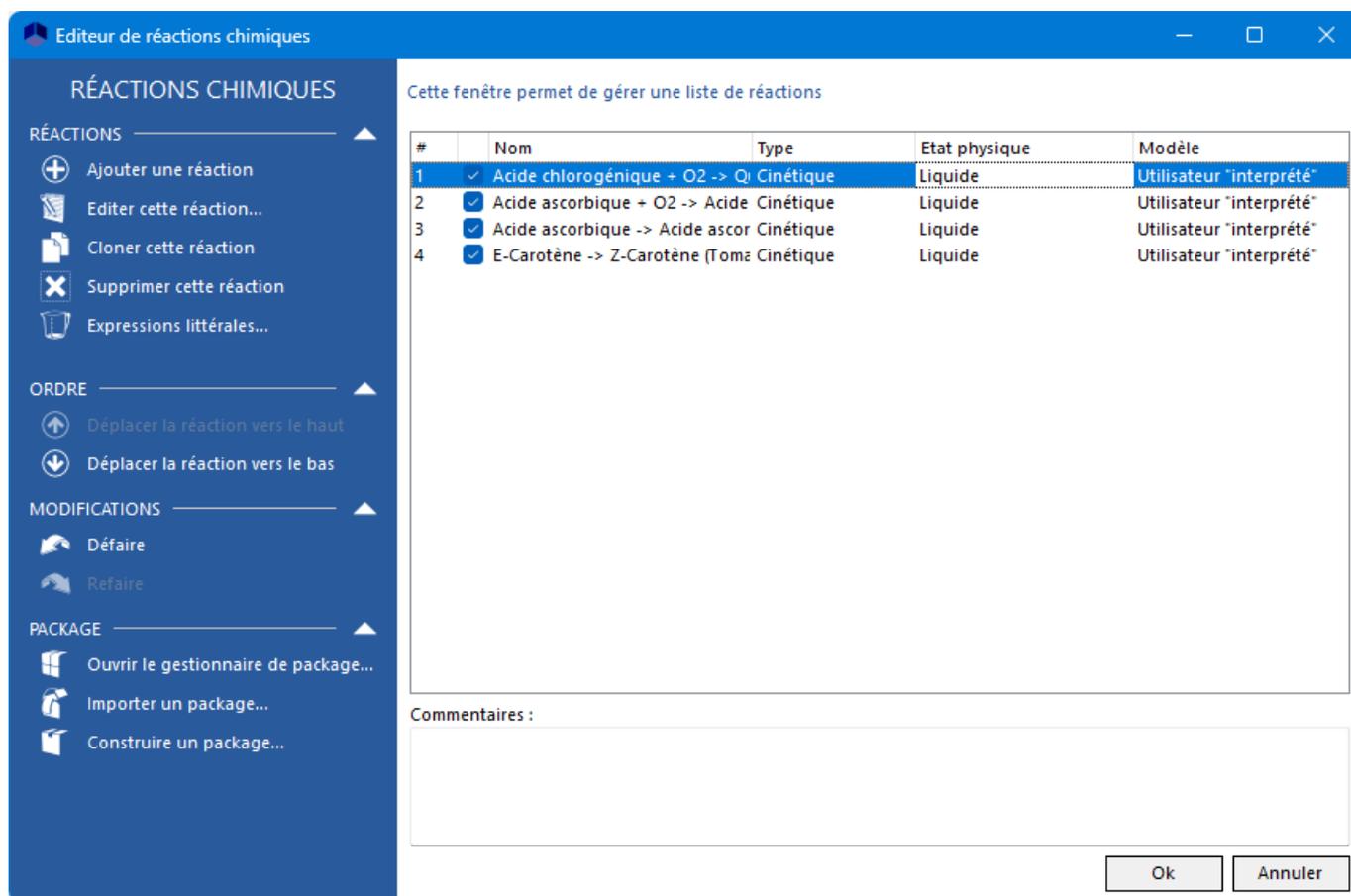
$$r_{Caro} = k_{Caro}^0 \times \exp\left(\frac{-Ea_{Caro}}{RT}\right) \times [E-Carotène] \quad (R4)$$

Tous les paramètres proviennent de [BRA12] et sont présentés dans le tableau ci-dessous. En dehors des plages de température indiquées, il est considéré que les réactions correspondantes ne se produisent pas (vitesse de réaction nulle).

Constituant	Plage de température	Paramètres
Acide chlorogénique (ACHL)	25°C – 95°C	$k_{ACHL}^0 = 5180 \text{ min}^{-1}$ $Ea_{ACHL} = 35100 \text{ J.mol}^{-1}$
Acide ascorbique (AASC)	25°C – 95°C	$k_{AASC}^0 = 12300 \text{ min}^{-1}100\text{g/mg}$ $Ea_{AASC} = 37400 \text{ J.mol}^{-1}$
	25°C – 125°C	$k_{AASC(dégrad.)}^0 = 1,75e6 \text{ min}^{-1}$ $A_{AASC(dégrad.)} = 7480 \text{ K}$
β -Carotène (Caro)	95°C – 125°C	$k_{Caro}^0 = 2070 \text{ min}^{-1}$ $Ea_{Caro} = 39300 \text{ J.mol}^{-1}$

6.2. Implémentation du modèle cinétique en utilisant Simulis Reactions

Les réactions sont décrites dans Simulis Reactions, comme illustré sur la figure suivante.

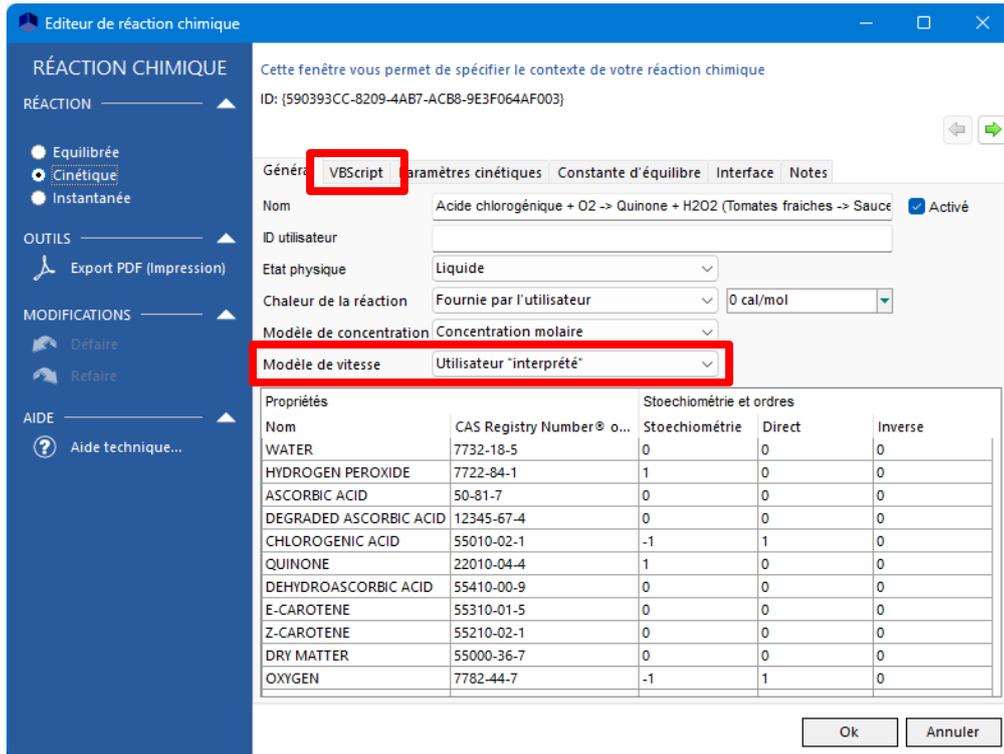


Etant donné que les paramètres cinétiques des réactions sont modifiés en fonction de la plage de températures, le mode « utilisateur interprété » a été utilisé pour implémenter le modèle cinétique présenté par [BRA12] pour les 4 réactions, comme présenté sur la figure ci-après. Cette fonctionnalité de Simulis Reactions permet à l'utilisateur de coder un modèle cinétique personnalisé en VBScript (Microsoft Visual Basic Scripting Edition), qui est un langage interprété (c'est-à-dire un langage ne nécessitant pas de compilateur). Pour plus d'informations sur le langage VBScript, se référer à :

[http://msdn.microsoft.com/en-us/library/t0aew7h6\(v=vs.84\).aspx](http://msdn.microsoft.com/en-us/library/t0aew7h6(v=vs.84).aspx)

<http://en.wikipedia.org/wiki/VBScript>

Toutes les réactions ont lieu en phase liquide et sont supposées athermiques.



Le code VBS pour la réaction (R1) est le suivant :

```
' CHECK PROCEDURE
Function CheckRate
    CheckRate = True
End Function

' CALCULATION PROCEDURE
' --- Data ---
' T: Variant - Temperature (K).
' P: Variant - Pressure (atm).
' z: Variant - Molar fractions.
' --- Results ---
' Rate: Variant - rate in mol/L/s.
' dRatedT: Variant - rate derivative with the respect to temperature in mol/L/s/K.
' dRatedP: Variant - rate derivative with the respect to pressure in mol/L/s/atm.
' dRatedN: Variant - rate derivative with the respect to number of moles in mol/L/s.
' Err: Variant - Error code.
Sub CalcRate(T, P, z, Rate, dRatedT, dRatedP, dRatedN, Err)
    'Model parameters
    R = 8.31                '(J/mol.K)
    K0 = 5.18E3/60        '(s-1)
    Ea = 35100             '(J/mol)
```

```

K = K0*exp(-Ea/(R*T)) '(s-1)
'Calculation of the molar volume
Vml = ThermoCalculator.PCalcVml(T,P,z)
'Units conversion
Set Quantity = Repository.QuantityByName("Molar volume")
Vml = Quantity.Convert(Vml,"cm3/mol","l/mol")
Set MwQty = Repository.QuantityByName("Molar mass")
'Calculation of the concentrations
CASN_ChloroAcid = "55010-02-1"
For i=1 To ThermoCalculator.Compounds.Count
  With ThermoCalculator.Compounds.Items(i-1)
    If (.CasRegistryNumber = CASN_ChloroAcid) Then
      ipos_ChloroAcid = i-1
      Mw_ChloroAcid = MwQty.Convert(.Mw.Value,.Mw.UnitName,"g/mol")
      C_ChloroAcid = z(ipos_ChloroAcid)*Mw_ChloroAcid/Vml
    End If
  End With
Next
'Calculation of the rate of the reaction
If (T >= 298.1 And T <= 368.2) Then 'Temperature between 25°C and 95°C
  Rate = K*C_ChloroAcid '(g/L.s)
  Rate = Rate/Mw_ChloroAcid '(mol/L.s)
Else
  Rate = 0
End If
End Sub

```

Le code VBS pour la réaction (R2) est le suivant :

```

' CHECK PROCEDURE
Function CheckRate
  CheckRate = True
End Function

' CALCULATION PROCEDURE
' --- Data ---
' T: Variant - Temperature (K).
' P: Variant - Pressure (atm).
' z: Variant - Molar fractions.
' --- Results ---
' Rate: Variant - rate in mol/L/s.
' dRatedT: Variant - rate derivative with the respect to temperature in mol/L/s/K.

```

```
' dRatedP: Variant - rate derivative with the respect to pressure in mol/L/s/atm.
' dRatedN: Variant - rate derivative with the respect to number of moles in mol/L/s.
' Err: Variant - Error code.
Sub CalcRate(T, P, z, Rate, dRatedT, dRatedP, dRatedN, Err)
  'Model parameters
  R = 8.31           '(J/mol.K)
  K0 = 12.3E3/60    '(s-1.100g/mg)
  Ea = 37400        '(J/mol)
  K = K0*exp(-Ea/(R*T)) '(s-1)

  'Calculation of the molar volume
  Vm1 = ThermoCalculator.PCalcVm1(T,P,z)

  'Units conversion
  Set Quantity = Repository.QuantityByName("Molar volume")
  Vm1          = Quantity.Convert(Vm1,"cm3/mol","l/mol")
  Set MwQty    = Repository.QuantityByName("Molar mass")

  'Calculation of the concentrations
  CASN_Oxygen = "7782-44-7"
  For i=1 To ThermoCalculator.Compounds.Count
    With ThermoCalculator.Compounds.Items(i-1)
      If (.CasRegistryNumber = CASN_Oxygen) Then
        ipos_Oxygen = i-1
        Mw_Oxygen   = MwQty.Convert(.Mw.Value,.Mw.UnitName,"g/mol")
        C_Oxygen    = z(ipos_Oxygen)*Mw_Oxygen/Vm1
      End If
    End With
  Next

  CASN_AscorbicAcid = "50-81-7"
  For i=1 To ThermoCalculator.Compounds.Count
    With ThermoCalculator.Compounds.Items(i-1)
      If (.CasRegistryNumber = CASN_AscorbicAcid) Then
        ipos_AscorbicAcid = i-1
        Mw_AscorbicAcid   = MwQty.Convert(.Mw.Value,.Mw.UnitName,"g/mol")
        C_AscorbicAcid    = z(ipos_AscorbicAcid)*Mw_AscorbicAcid/Vm1
      End If
    End With
  Next

  'Calculation of the reaction rate
```

```

C_Oxygen = C_Oxygen*100           '(mg/100g)
K = K*C_Oxygen
If (T >= 298.1 And T <= 368.2) Then 'Temperature between 25°C and 95°C
    Rate = K*C_AscorbicAcid        '(g/L.s)
    Rate = Rate/Mw_AscorbicAcid    '(mol/L.s)
Else
    Rate = 0
End If
End Sub

```

Le code VBS pour la réaction (R3) est le suivant :

```

' CHECK PROCEDURE
Function CheckRate
    CheckRate = True
End Function

' CALCULATION PROCEDURE
' --- Data ---
' T: Variant - Temperature (K).
' P: Variant - Pressure (atm).
' z: Variant - Molar fractions.
' --- Results ---
' Rate: Variant - rate in mol/L/s.
' dRatedT: Variant - rate derivative with the respect to temperature in mol/L/s/K.
' dRatedP: Variant - rate derivative with the respect to pressure in mol/L/s/atm.
' dRatedN: Variant - rate derivative with the respect to number of moles in mol/L/s.
' Err: Variant - Error code.
Sub CalcRate(T, P, z, Rate, dRatedT, dRatedP, dRatedN, Err)
    'Model parameters
    R = 8.31           '(J/mol.K)
    K0 = 1.75E6/60    '(s-1)
    A = 7.48E3        '(K)
    K = K0*exp(-A/T) '(s-1)
    'Calculation of the molar volume
    Vm1 = ThermoCalculator.PCalcVm1(T,P,z)
    'Units conversion
    Set Quantity = Repository.QuantityByName("Molar volume")
    Vm1 = Quantity.Convert(Vm1,"cm3/mol","l/mol")
    Set MwQty = Repository.QuantityByName("Molar mass")
    'Calculation of the concentrations
    CASN_AscorbicAcid = "50-81-7"

```

```

For i=1 To ThermoCalculator.Compounds.Count
  With ThermoCalculator.Compounds.Items(i-1)
    If (.CasRegistryNumber = CASN_AscorbicAcid) Then
      ipos_AscorbicAcid = i-1
      Mw_AscorbicAcid = MwQty.Convert(.Mw.Value,.Mw.UnitName,"g/mol")
      C_AscorbicAcid = z(ipos_AscorbicAcid)*Mw_AscorbicAcid/Vml
    End If
  End With
Next
'Calculation of the reaction rate
If (T >= 298.1 And T <= 398.2) Then 'Temperature between 25°C and 125°C
  Rate = K*C_AscorbicAcid '(g/L.s)
  Rate = Rate/Mw_AscorbicAcid '(mol/L.s)
Else
  Rate = 0
End If
End Sub

```

Le code VBS pour la réaction (R4) est le suivant :

```

' CHECK PROCEDURE
Function CheckRate
  CheckRate = True
End Function

' CALCULATION PROCEDURE
' --- Data ---
' T: Variant - Temperature (K).
' P: Variant - Pressure (atm).
' z: Variant - Molar fractions.
' --- Results ---
' Rate: Variant - rate in mol/L/s.
' dRatedT: Variant - rate derivative with the respect to temperature in mol/L/s/K.
' dRatedP: Variant - rate derivative with the respect to pressure in mol/L/s/atm.
' dRatedN: Variant - rate derivative with the respect to number of moles in mol/L/s.
' Err: Variant - Error code.
Sub CalcRate(T, P, z, Rate, dRatedT, dRatedP, dRatedN, Err)
  'Model parameters
  R = 8.31 '(J/mol.K)
  K0 = 2.07E3/60 '(s-1)
  Ea = 39300 '(J/mol)
  K = K0*exp(-Ea/(R*T)) '(s-1)

```

```
'Calculation of the molar volume
Vml=ThermoCalculator.PCalcVml(T,P,z)
'Units conversion
Set Quantity = Repository.QuantityByName("Molar volume")
Vml = Quantity.Convert(Vml,"cm3/mol","l/mol")
Set MwQty = Repository.QuantityByName("Molar mass")
'Calculation of the concentrations
CASN_ECarotene = "55310-01-5"
For i=1 To ThermoCalculator.Compounds.Count
  With ThermoCalculator.Compounds.Items(i-1)
    If (.CasRegistryNumber = CASN_ECarotene) Then
      ipos_ECarotene = i-1
      Mw_ECarotene = MwQty.Convert(.Mw.Value,.Mw.UnitName,"g/mol")
      C_ECarotene = z(ipos_ECarotene)*Mw_ECarotene/Vml
    End If
  End With
Next
'Calculation of the reaction rate
If (T >= 368.1 And T <= 398.2) Then 'Temperature between 95°C and 125°C
  Rate = K*C_ECarotene '(g/L.s)
  Rate = Rate/Mw_ECarotene '(mol/L.s)
Else
  Rate = 0
End If
End Sub
```

7. SIMULATION

7.1. Description du procédé

Les caractéristiques du réacteur utilisé dans le procédé de concentration de tomates fraîches sont les suivantes :

Réacteur	
Type	Diphasique liquide-vapeur, fermé
Volume global (vapeur + liquide)	500 l
Type de ciel	Air

Les conditions initiales sont données dans le tableau suivant. Pour le cas où $T = 105^{\circ}\text{C}$, une pression de fonctionnement de 1,3 atm est imposée afin d'éviter l'évaporation de l'eau. Une masse de 10 kg de matière sèche est choisie et les charges initiales de tous les autres constituants sont calculées en fonction de cette quantité. La matière sèche représentant approximativement 5% du poids de la charge initiale, la charge initiale de l'eau est de 200 kg. Le ciel étant initialement constitué d'air, le modèle calcule les concentrations initiales d'oxygène et d'azote en phase liquide, correspondant aux valeurs de solubilités dans les conditions opératoires données.

	Conditions expérimentales [BRA12]				Conditions initiales de simulation			
	50°C	70°C	95°C	105°C	50°C	70°C	95°C	105°C
Température	50°C	70°C	95°C	105°C	50°C	70°C	95°C	105°C
Pression	Non spécifiée				1 atm			1,3 atm
	Concentration expérimentale [BRA12] (mg/100g _{matière_sèche})				Charges initiales de la simulation			
Eau	Non spécifiée				200 kg			
Matière sèche	Non spécifiée				10 kg			
Acide chlorogénique	8,88	Non spécifiée			0,888 g			
Acide ascorbique	282	338	271	247	28,2 g	33,8 g	27,1 g	24,7 g
E-carotène	Non spécifiée		4,24	Non spécifiée	0,424 g			
Autres constituants	0				0 g			

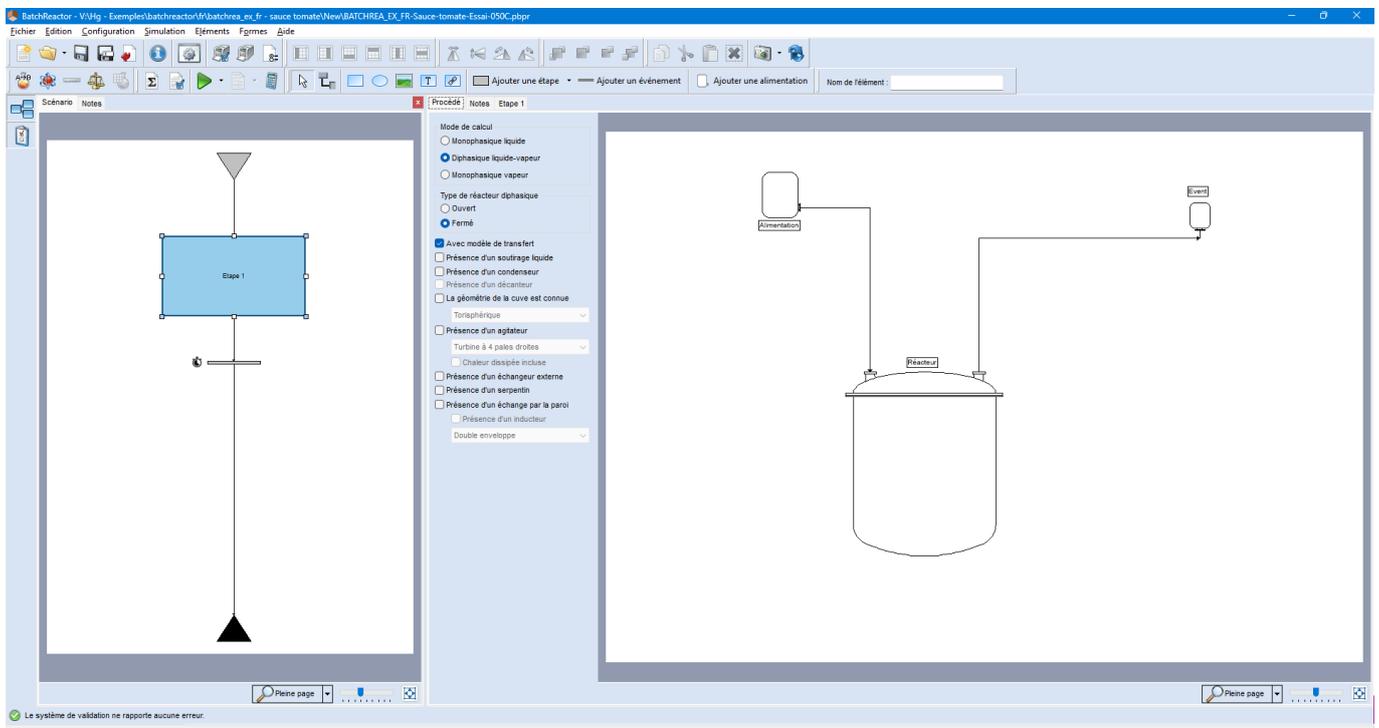
Un flux d'air alimente en continu le réacteur afin que l'oxygène soit toujours en excès dans la phase gaz. Les caractéristiques de ce flux sont les suivantes :

Température	50°C	70°C	95°C	105°C
Pression	1 atm			1,3 atm
Débit total	10 kg/h			
Fractions molaires				
Oxygène	0,21			
Azote	0,79			

Le mode opératoire est constitué d'une seule étape isotherme avec les paramètres suivants :

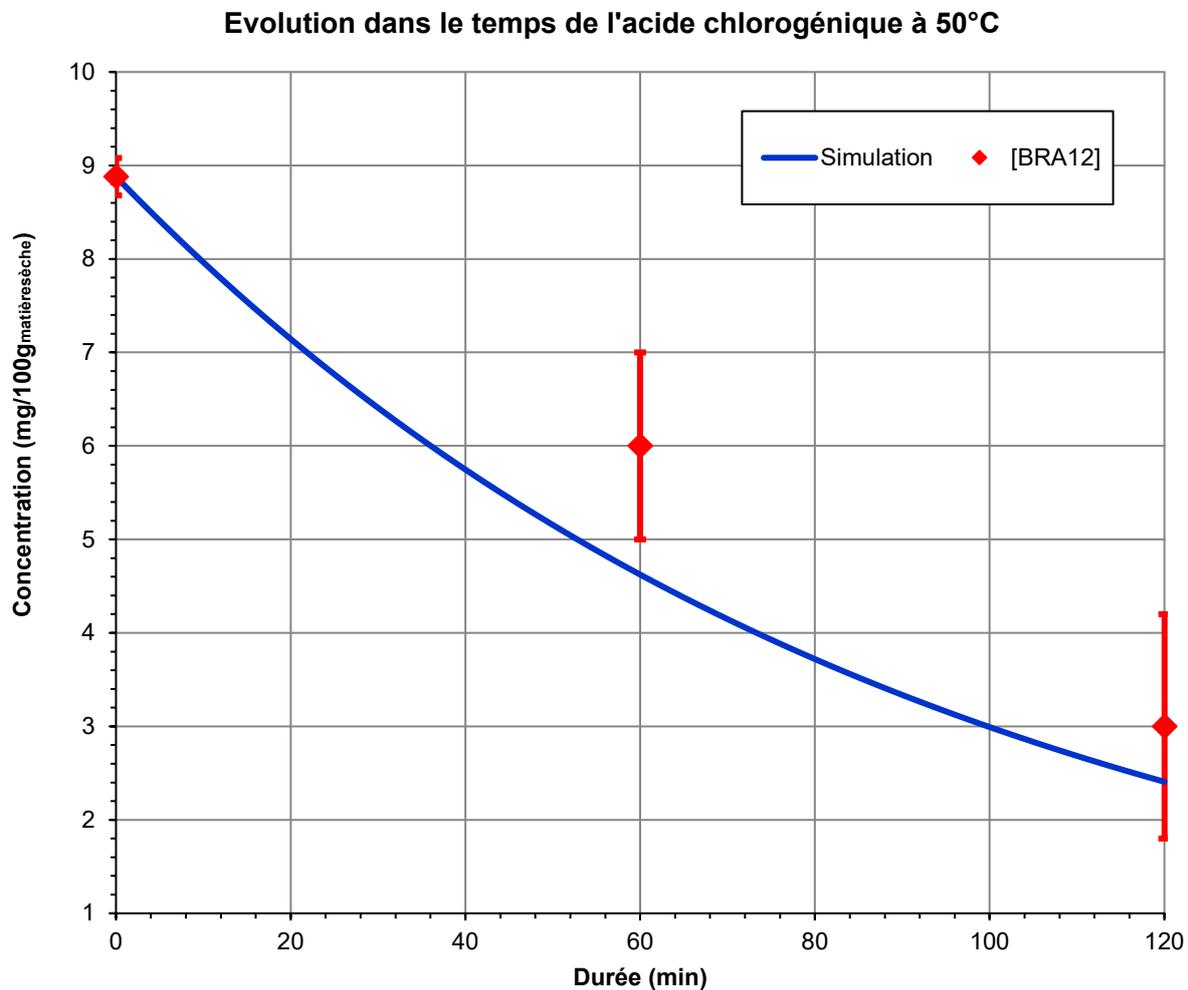
Type	Température du réacteur fixée			
Température	50°C	70°C	95°C	105°C
Pression	1 atm			1,3 atm
Durée de l'étape	2 h		1 h	

La figure suivante présente la fenêtre principale : le scénario apparaît à gauche de l'écran, et le schéma procédé à droite.

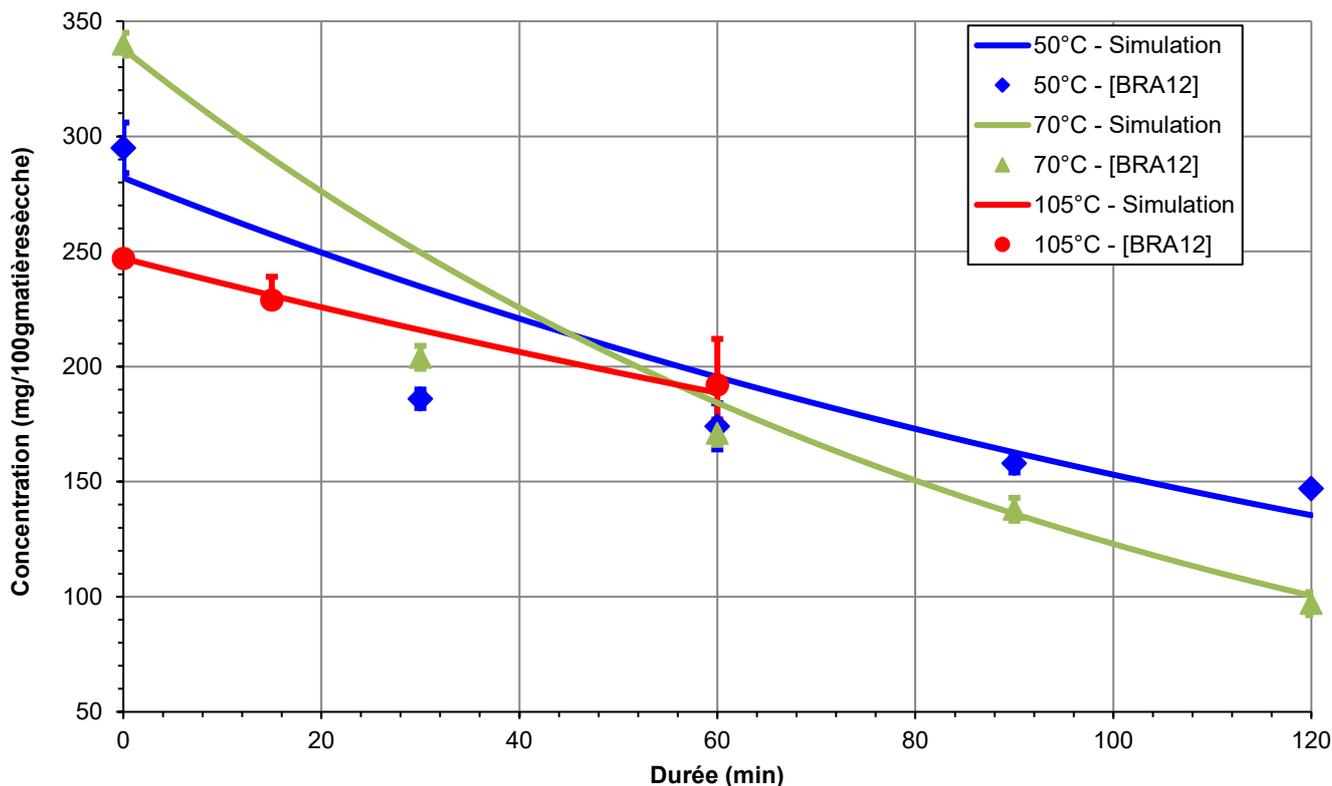


7.2. Résultats

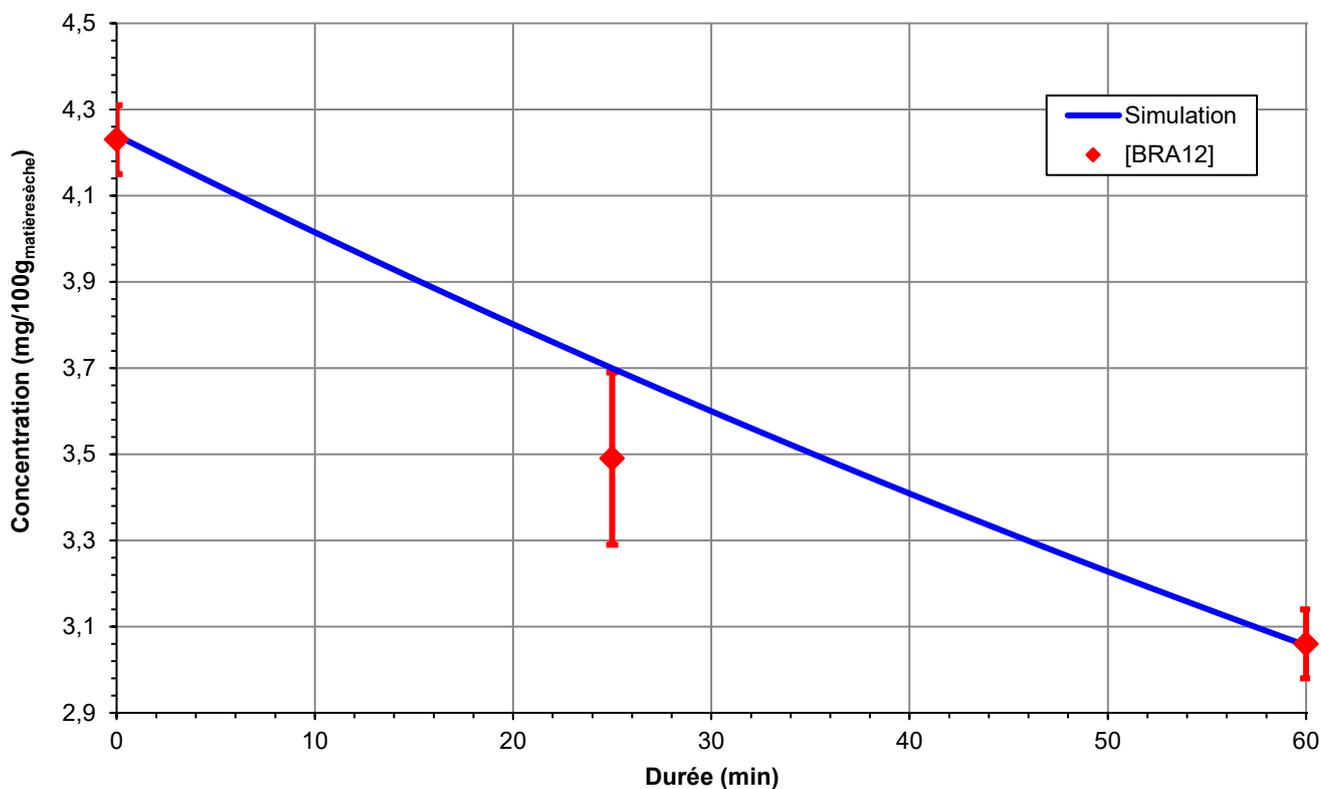
Le graphique suivant permet de comparer les profils de concentration obtenus par BatchReactor et les données expérimentales provenant de [BRA12].



Evolution dans le temps de la concentration de l'acide ascorbique



Evolution dans le temps de la concentration du E-carotène à 95°C



8. BIBLIOGRAPHIE

- [BRA12] BRANDAM C., MEYER X., ROLAND M., "Application et validation industrielle d'un modèle prédictif de la qualité nutritionnelle de produits à base de tomate au cours des procédés de fabrication", DGAL Convention a13 PACA 05 12-1
- [ROW21] 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 (2021)

9. NOMENCLATURE

A_i	Constante cinétique	K
C_i	Concentration molaire du constituant i	mol/l
Ea_i	Énergie d'activation	J/mol
k_i^0	Facteur pré-exponentiel	min ⁻¹
$k_L a$	Coefficient de transfert de matière volumique	min ⁻¹
R	Constante des gaz parfaits	J/(mol.K)
r_i	Vitesse de réaction	g/(l.s)
T	Température	K
$[X]$	Concentration massique du constituant X	g/l
ϕ	Flux de transfert de matière	(mol/(l.min))