

Démarrer avec BatchReactor®

Cas 3 : Modélisation de la résistance au transfert de matière

Software & Services In Process Simulation

We guide You to efficiency







ProSim

Introduction

Dans le cas d'un réacteur diphasique simulé avec BatchReactor®, les phases gaz et liquide sont, par défaut, considérées à l'**équilibre thermodynamique**. Cette hypothèse est vraie à condition que la cinétique de transfert de matière soit suffisamment rapide. Cependant, dans certaines applications (réactions hétérogènes, bioréacteurs...), il est nécessaire d'affiner la simulation en tenant compte de la **résistance au transfert de matière**. Cela permet ainsi d'analyser l'influence des équipements (type d'agitateur, de cuve...) et des conditions opératoires (débit d'alimentation gaz, vitesse de rotation...) sur la **cinétique de transfert de matière**.

Ce document présente l'utilisation du **modèle de transfert de matière** dans BatchReactor®.

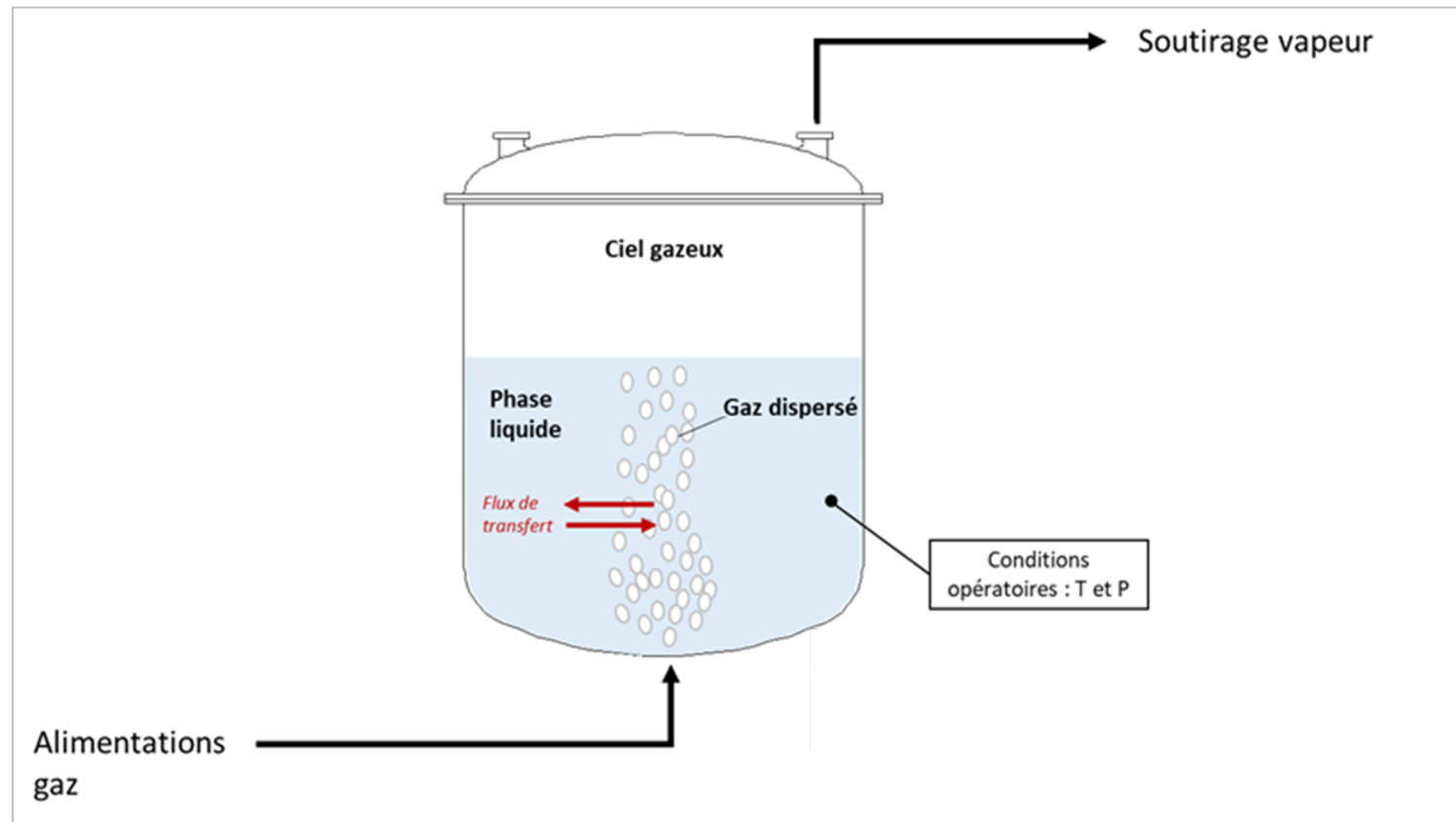
Les étapes sont les suivantes :

-  Etape 1 : sélection des constituants
-  Etape 2 : configuration de la topologie du réacteur et du modèle de transfert
-  Etape 3 : description du mode opératoire
-  Etape 4 : simulation de différentes configurations

Avant de lire ce document, il est recommandé de consulter « Démarrer avec BatchReactor - Cas 1 »

Description du modèle

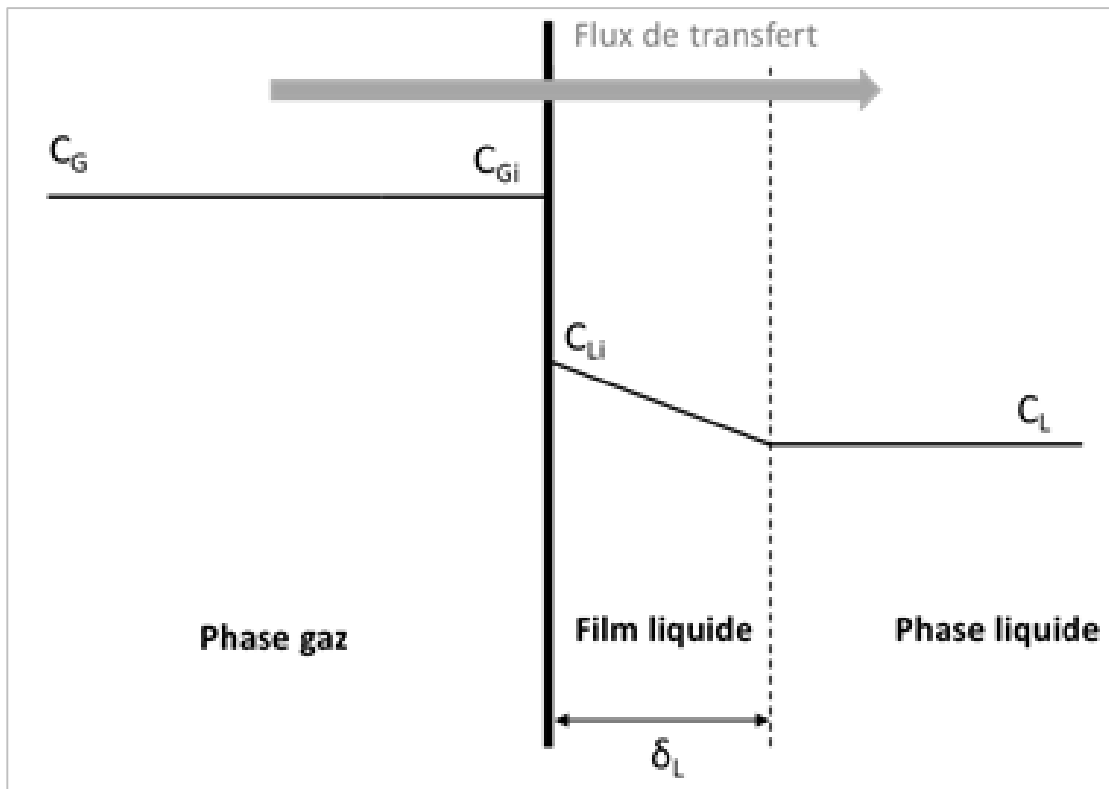
Ce tutoriel s'appuie sur l'exemple d'un réacteur alimenté par un **flux d'oxygène** qui crée une **phase dispersée** au sein de la phase liquide. L'objectif est d'utiliser le modèle de transfert afin d'analyser l'influence de la **cinétique de transfert** sur les compositions des différentes phases.



Le **flux de transfert de matière** de l'oxygène correspond au débit molaire d'oxygène absorbé (ou strippé) en phase liquide.

Description du modèle

Le modèle de transfert est fondé 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.



Avec :

- C_G, C_L : concentration gaz, liquide (mol/L)
- C_{Gi}, C_{Li} : concentration gaz, liquide à l'interface (mol/L)
- δ_L : épaisseur du film liquide (m)

Description du modèle

Le **flux de transfert** de chaque constituant est obtenu à partir de la relation suivante :




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

Avec :

Φ Flux de transfert de matière (mol/(L.h))

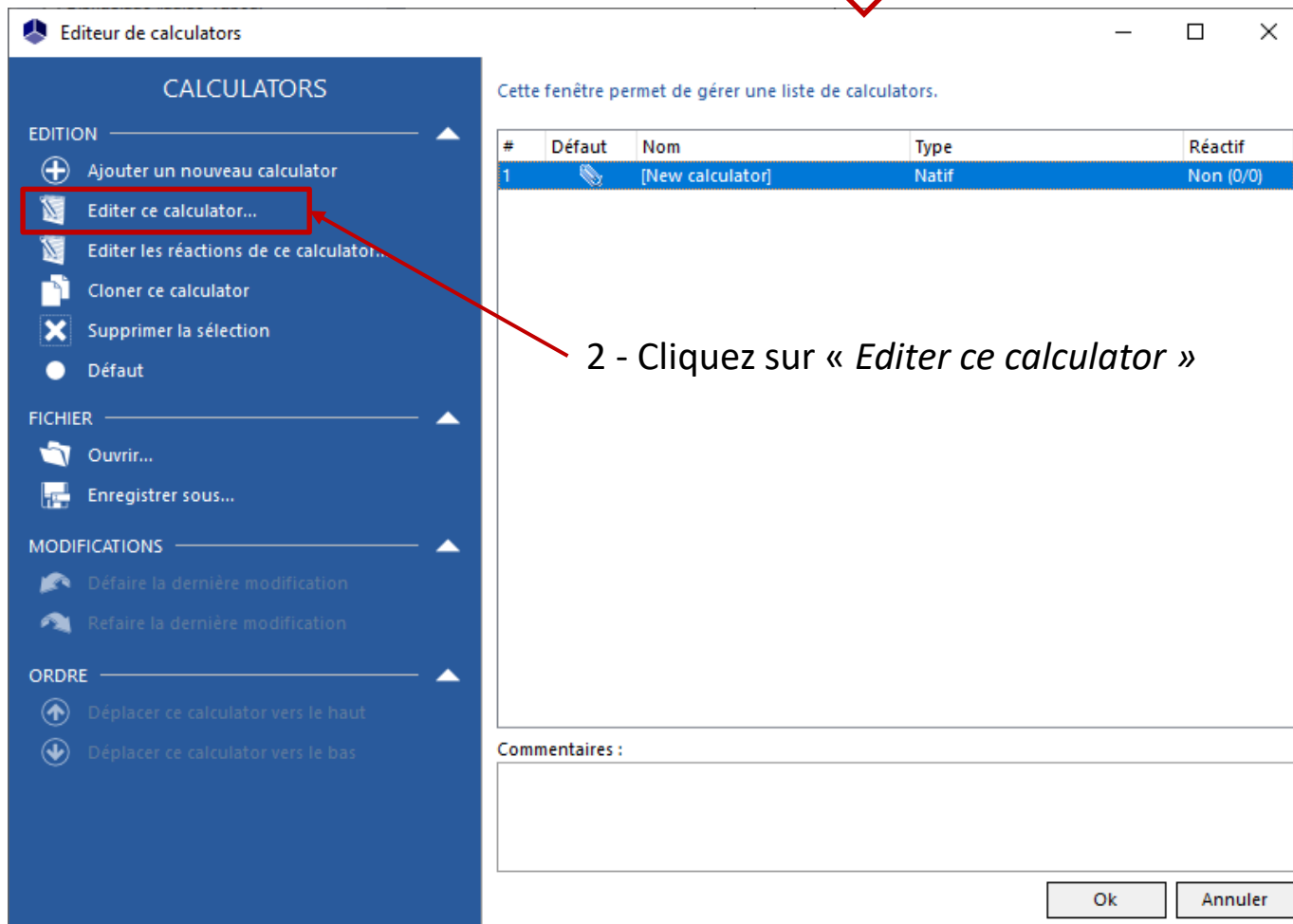
$k_L a$ Coefficient volumique de transfert de matière en phase liquide (h⁻¹)

Les trois configurations suivantes seront simulées :

-  Configuration 1 : sans résistance au transfert ($k_L a$ infiniment grand)
-  Configuration 2 : avec résistance au transfert et $k_L a$ prédit par le logiciel
-  Configuration 3 : avec résistance au transfert et $k_L a$ obtenu à partir de données expérimentales

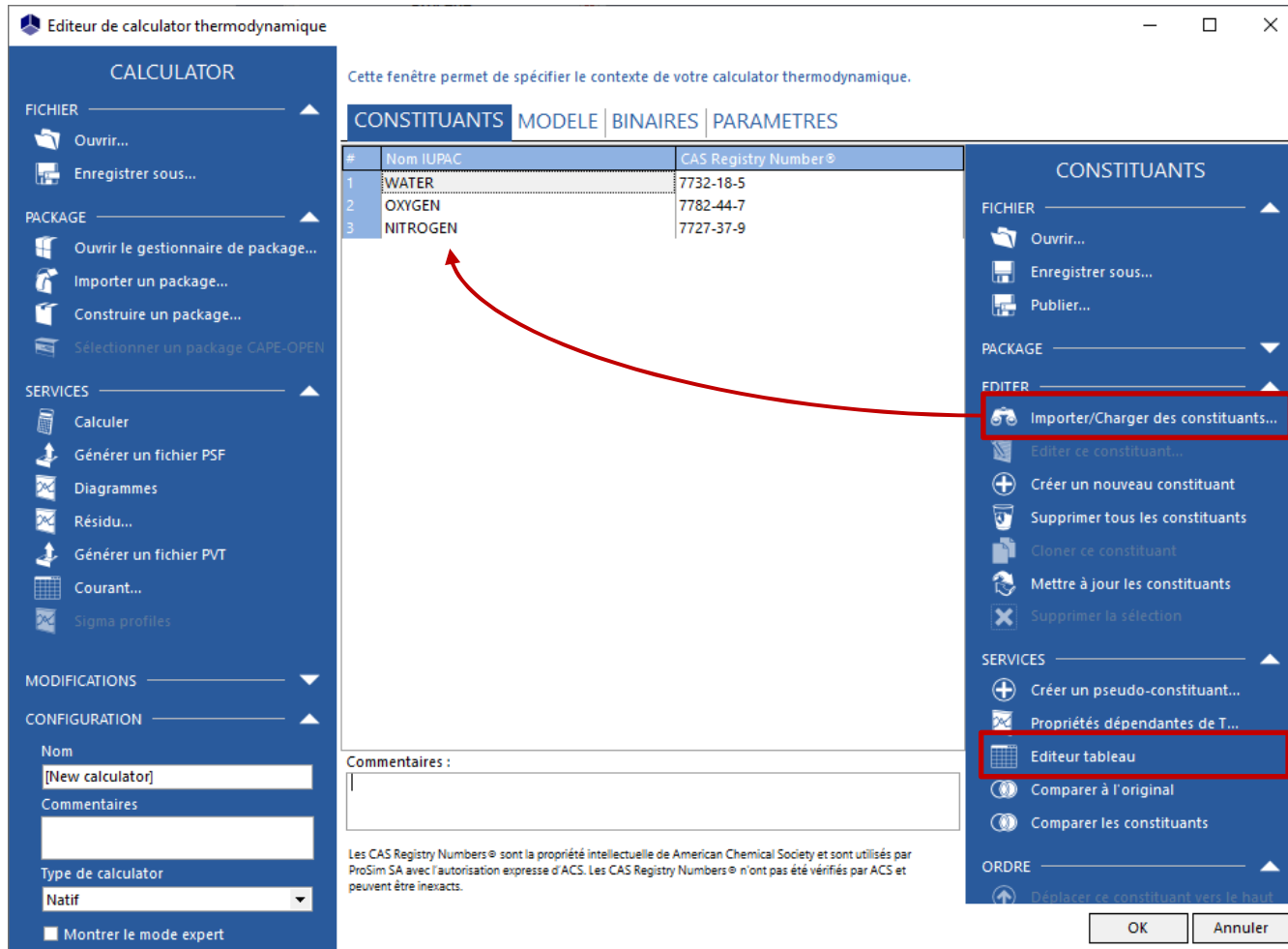
Etape 1 : sélection des constituants

1 - Cliquez sur le bouton « *Modifier la thermodynamique et les constituants* » afin d'accéder à « *l'Editeur de calculators* »



Etape 1 : sélection des constituants

1 - Importez les constituants suivants : eau, oxygène et azote



2 - Cliquez ici afin de modifier les propriétés



Pour plus d'information sur la sélection et l'édition des constituants, consultez
« Démarrer avec Simulis Thermodynamics - Cas 1 »

Etape 1 : sélection des constituants

1 - La loi de Henry est utilisée afin de calculer la solubilité de l'oxygène et de l'azote dans l'eau. Cela nécessite de modifier la propriété « *Type de calcul liquide - vapeur* » dans la catégorie « *Changement de phase* »

Editeur de constituant

CONSTITUANTS

PROPRIÉTÉS

Aide sur les propriétés...

AFFICHAGE

Créer une vue

Supprimer cette vue

Modifier cette vue

MODIFICATIONS

Défaire

Réfaire

SYSTEMES D'UNITES

Pour les propriétés

Cette fenêtre vous aide à visualiser les propriétés des constituants.

Complète

Propriétés	WATER	OXYGEN	NITROGEN
Identification			
Modèles de contribution de groupes			
Atomique			
Changement de phase			
Température normale de fusion	0 °C	-218.789 °C	-210.001 °C
Température normale d'ébullition	100 °C	-182.962 °C	-195.806 °C
Enthalpie de fusion	1434.4502868068...	106.118546845124 cal/...	172.08413001912 cal/mol
Température du point triple	0.01000000000000...	-218.789 °C	-210.001 °C
Pression du point triple	0.0060373056994...	0.00148038490007402 ...	0.123562792992845 atm
Etat physique à 25°C	Liquide	Supercritique	Supercritique
Etat physique en solution aqueuse à 25°C	<inconnu>	<inconnu>	<inconnu>
Coefficient de diffusion			
Enthalpie de vaporisation			
Coefficient de partition Octanol-Eau	<inconnu>	<inconnu>	<inconnu>
Coefficient d'infiltration dans le sol (Koc@20°C)			
Type de calcul Liquide-Vapeur	<inconnu>	Constante de Henry	Constante de Henry
Facteur acentrique	0.344861	0.0221798	0.0377215
Facteur acentrique modifié	0.7023	0.021	0.04
Température critique	373.946 °C	-118.57 °C	-146.95 °C
Pression critique	217.75474956822...	49.7705403404885 atm	33.5553910683444 atm
Volume critique	55.9472 cm3/mol	73.4 cm3/mol	89.21 cm3/mol
Facteur de compressibilité critique	0.229	0.288	0.289
Densité critique	0.0178739954814...	0.0136239782016349 ...	0.0112095056608004 mol...
Chaleur de sublimation au point triple	12141.491395793...		
Température de transition vitreuse			
Combustion, sécurité, toxicité			
Phase condensée			
Thermo-chimique			

Les CAS Registry Numbers® sont la propriété intellectuelle de American Chemical Society et sont utilisés par ProSim SA avec l'autorisation expresse d'ACS. Les CAS Registry Numbers® n'ont pas été vérifiés par ACS et peuvent être inexacts.

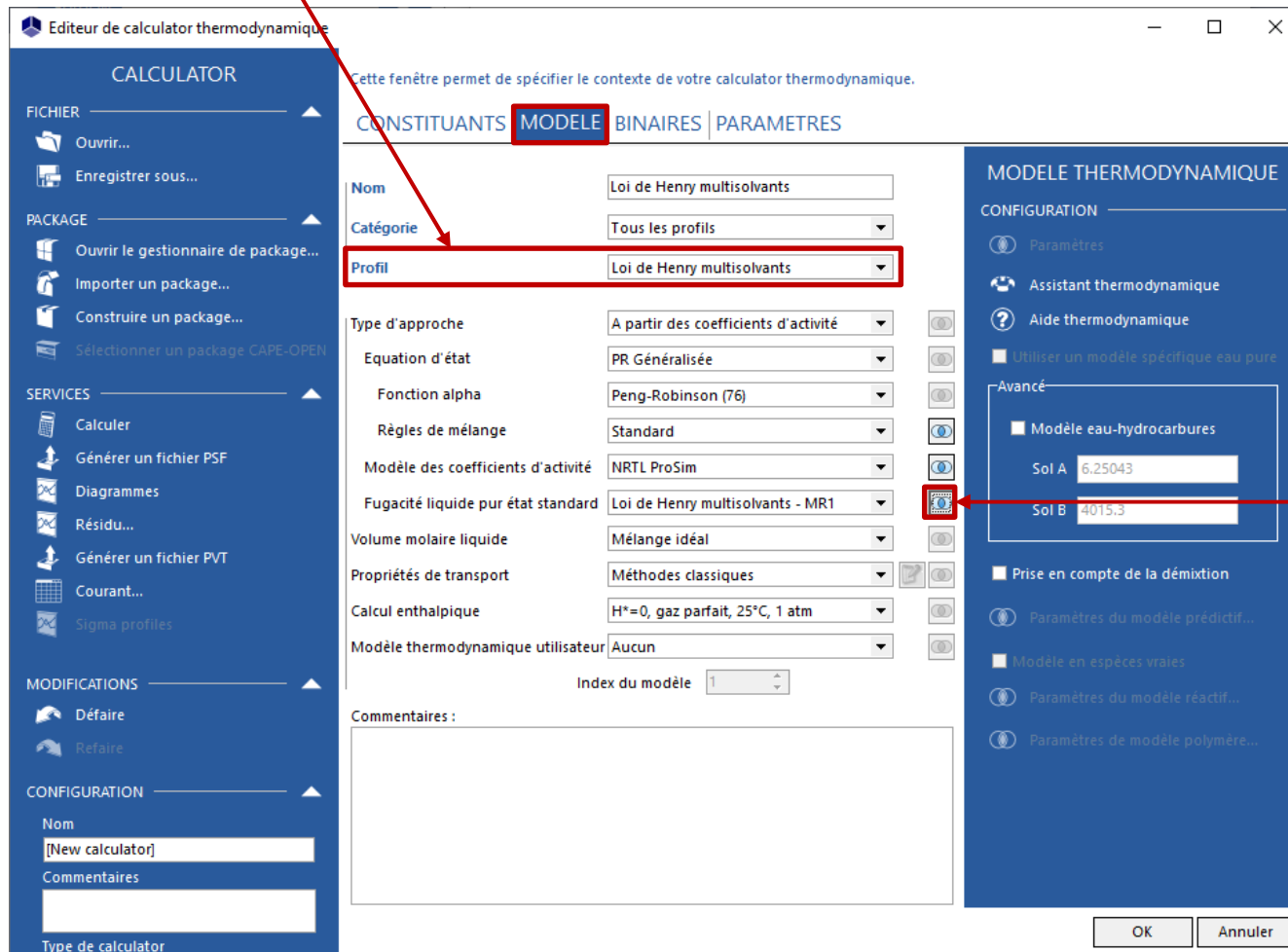
Ok Annuler

2 - Pour l'oxygène et l'azote, sélectionnez « *Constante de Henry* »

3 - Cliquez sur « *OK* »

Etape 1 : sélection des constituants

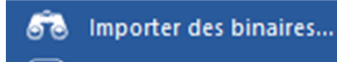
1 - Dans l'onglet « *Modèle* », sélectionnez le profil thermodynamique « *Loi de Henry multisolvants* »



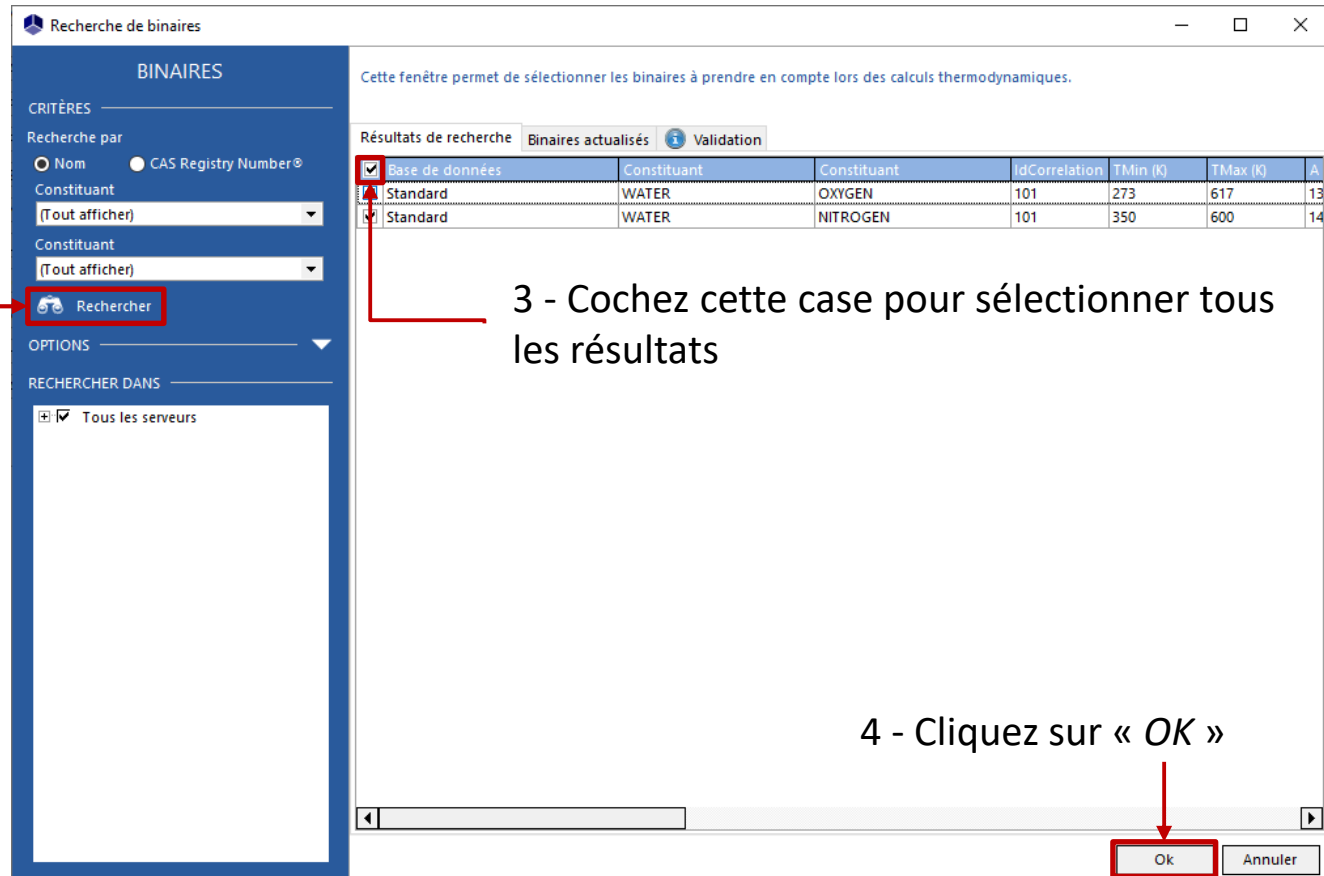
2 - Cliquez sur ce bouton afin d'accéder aux paramètres de la loi de Henry

Etape 1 : sélection des constituants

1 - Cliquez sur « Importer des binaires »



2 - Cliquez sur « Rechercher »



Recherche de binaires

BINAIRE

CRITÈRES

Recherche par

☒ Nom ☐ CAS Registry Number®

Constituant

(Tout afficher)

Constituant

(Tout afficher)

☒ Rechercher

OPTIONS

RECHERCHER DANS

☒ Tous les serveurs

Cette fenêtre permet de sélectionner les binaires à prendre en compte lors des calculs thermodynamiques.

Résultats de recherche Binaires actualisés Validation

	Base de données	Constituant	Constituant	IdCorrelation	TMin (K)	TMax (K)	A
<input checked="" type="checkbox"/>	Standard	WATER	OXYGEN	101	273	617	13
<input checked="" type="checkbox"/>	Standard	WATER	NITROGEN	101	350	600	14

3 - Cochez cette case pour sélectionner tous les résultats

4 - Cliquez sur « OK »

Ok Annuler

Etape 1 : sélection des constituants

1 - Les paramètres de la loi de Henry sont affichés ici (affichage : grille)

Editeur de binaires

BINAIRES

ACTIONS

- Importer des binaires...
- Tout effacer...
- Estimer les binaires...
- Enregistrer les binaires...

MODIFICATIONS

- Défaire
- Refaire

OPTIONS

Unité

☐ les paramètres seront ignorés

Affichage : ☒ Grille ☐ Matrice

Cette fenêtre permet de saisir les binaires à prendre en compte lors des calculs thermodynamiques.

Ces paramètres sont utilisés en lieu et place de ceux définis dans l'onglet "Binaires" du calculator.

Formulation : Dépend de la corrélation utilisée (voir Loi de Henry pour constituant) (atm)

Constituant	Constituant	IdCorrelation	TMin (K)	TMax (K)	A	B
WATER	OXYGEN	101	273	617	139,485	-68
WATER	NITROGEN	101	350	600	141,2677	-69
OXYGEN	NITROGEN	0	0	0	0	0

Non fourni Fournis Importés Estimés

Commentaires :

2 - Cliquez sur « OK »

OK Annuler

Etape 1 : sélection des constituants

La configuration du « *Calculator thermodynamique* » est terminée. Cliquez sur « OK » et retournez à l'interface principale

Editeur de calculator thermodynamique

Cette fenêtre permet de spécifier le contexte de votre calculator thermodynamique.

CONSTITUANTS | **MODELE** | BINAIRES | PARAMETRES

MODELE THERMODYNAMIQUE

CONFIGURATION

- Paramètres
- Assistant thermodynamique
- Aide thermodynamique
- Utiliser un modèle spécifique eau pure

Avancé

- ☒ Modèle eau-hydrocarbures
 - Sol A 6.25043
 - Sol B 4015.3
- ☐ Prise en compte de la démixtion
 - Paramètres du modèle prédictif...
 - ☐ Modèle en espèces vraies
 - Paramètres du modèle réactif...
 - Paramètres de modèle polymère...

CONSTITUANTS

Nom: Loi de Henry multisolvants

Catégorie: Tous les profils

Profil: Loi de Henry multisolvants

Type d'approche: A partir des coefficients d'activité

Equation d'état: PR Généralisée

Fonction alpha: Peng-Robinson (76)

Règles de mélange: Standard

Modèle des coefficients d'activité: NRTL ProSim

Fugacité liquide pur état standard: Loi de Henry multisolvants - MR1

Volume molaire liquide: Mélange idéal

Propriétés de transport: Méthodes classiques

Calcul enthalpique: $H^*=0$, gaz parfait, 25°C, 1 atm

Modèle thermodynamique utilisateur: Aucun

Index du modèle: 1

Commentaires :

OK Annuler



Pour plus d'information sur la configuration du profil thermodynamique, consultez « Démarrer avec Simulis Thermodynamics - Cas 1 »

Etape 2 : configuration de la topologie du réacteur et du modèle de transfert

De retour à l'interface principale, renseignez la topologie de réacteur au niveau de l'onglet « *Procédé* »

Procédé

Mode de calcul

☐ Monophasique liquide

☒ Diphasique liquide-vapeur

☐ Monophasique vapeur

Type de réacteur diphasique

☐ Ouvert

☒ Fermé

☒ Avec modèle de transfert

☐ Présence d'un soutirage liquide

☐ Présence d'un condenseur

☐ Présence d'un décanteur

☒ La géométrie de la cuve est connue

Torisphérique

☒ Présence d'un agitateur

Hélice à 4 pales inclinées

☐ Chaleur dissipée incluse

☐ Présence d'un échangeur externe






☐ Présence d'un serpentín

☐ Présence d'un échangeur par la paroi

☐ Présence d'un inducteur

Double enveloppe

1 - Cochez les éléments suivants dans le panneau de contrôle :

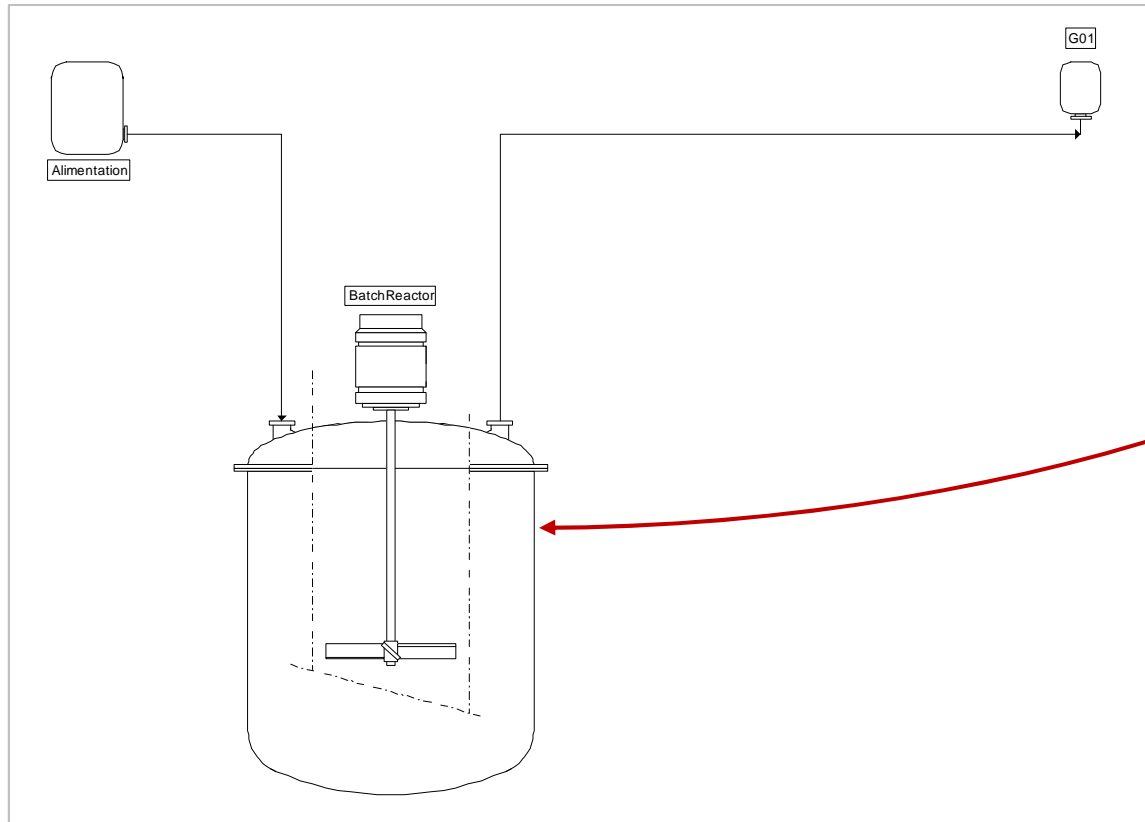
-  Mode de calcul : diphasique liquide - vapeur
-  Type de réacteur diphasique : fermé
-  Avec modèle de transfert
-  La géométrie de la cuve est de type « *Torisphérique* »
-  Présence d'un agitateur de type « *Hélice à 4 pales inclinées* »



Une fois le modèle de transfert configuré, il suffira de cocher/décocher l'option « *Avec modèle de transfert* » pour basculer entre le modèle de transfert et le modèle d'équilibre thermodynamique (modèle par défaut)

Etape 2 : configuration de la topologie du réacteur et du modèle de transfert

De retour à l'interface principale, renseignez la topologie de réacteur au niveau de l'onglet « *Procédé* »



2 - Double-cliquez sur le réacteur afin de renseigner les conditions initiales et les paramètres globaux

Etape 2 : configuration de la topologie du réacteur et du modèle de transfert

Dans la fenêtre de configuration du réacteur, renseignez les éléments suivants :

Réacteur

Nom :

Paramètres Notes Paramètres avancés Validation

Alimentations

Température [TR]

Température donnée

Alarms [TR]

Minimum

Maximum

Productions vapeur

Pression [PR]

Pression donnée

Productions liquide

Volume global du réacteur [GVR]

Alarms [VR]

Minimum

Maximum

Restaurer Technologie

1 - Les conditions initiales :

- T = 22°C
- P = 1 atm
- V = 800 L

2 - Les alarmes :

- En température
Minimum : 0°C
Maximum : 100°C
- En volume
Minimum : 0,1 L
Maximum : 800 L

Etape 2 : configuration de la topologie du réacteur et du modèle de transfert

Dans la fenêtre de configuration du réacteur, renseignez les éléments suivants :

3 - La charge initiale :

478 L d'eau pure

Charge initiale

Charge initiale

Spécification de la charge initiale

Fractions Molaire

Constituant	Fraction
WATER	1
OXYGEN	0
NITROGEN	0

1,00000

Charge totale volumique 478 L

Restaurer OK Annuler

Un ciel gazeux composé d'air

Ciel

Ciel

Type de ciel

☒ Air

☐ Azote

☐ Autre

☐ Aucun

Variable d'ajustement

☐ Pression

☒ Température

N2 0,79 %

O2 0,21 %

= 3,76

Constituant "Pressurisant"

WATER

Restaurer OK Annuler

Etape 2 : configuration de la topologie du réacteur et du modèle de transfert

Dans la fenêtre de configuration du réacteur, renseignez les éléments suivants :

4 - Le modèle de transfert de matière

Transfert de matière

Coefficients volumiques de transfert de matière

Constituant	Modèle	Valeur
WATER	Pas de résistance	
OXYGEN	Pas de résistance	
NITROGEN	Pas de résistance	

Propriétés de la phase gaz

Phase gaz considérée pour le transfert de matière

☐ Ciel gazeux

☒ Gaz dispersé

% volumique: Calculé (dropdown) | Gao et al. (dropdown) | Paramètres

Calcul de la puissance dissipée en milieu aéré

Facteur de correction: Calculé (dropdown) | Brujin et al. (dropdown) | Paramètres

Restaurer OK Annuler

Configuration des $k_L a$ (détaillée dans l'étape 4 du document)

Phase gaz considérée pour le transfert de matière :

- Cochez « *Gaz dispersé* »
- Sélectionnez l'option « *Calculé* » et la corrélation par défaut pour le calcul du % volumique du gaz dispersé

Calcul de la puissance dissipée en milieu aéré

- Sélectionnez l'option « *Calculé* » et la corrélation par défaut



Appuyez sur « *F1* » afin d'accéder à l'aide en ligne comprenant les détails techniques et pratiques liés à la configuration de ce modèle

Etape 2 : configuration de la topologie du réacteur et du modèle de transfert

Dans la fenêtre de configuration du réacteur, renseignez les éléments suivants :

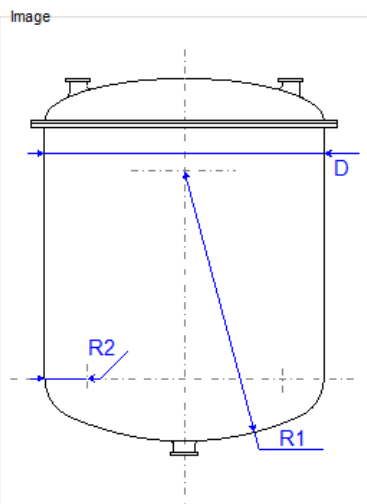
5 - Les caractéristiques géométriques des équipements :

Le bas de cuve

Géométrie du bas de cuve

☒ La géométrie de la cuve est connue

Image



Type de géométrie de fond de cuve
Torisphérique

Paramètres

Nombre de chicanes	0
Diamètre de la cuve (D)	1,165 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)	0,12 m

Restaurer Technologie OK Annuler

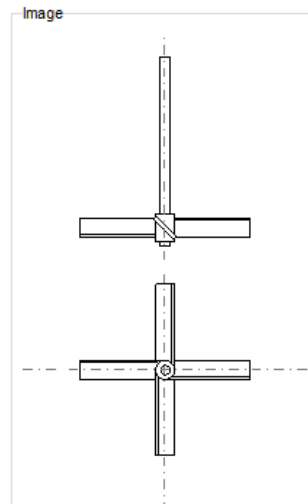
L'agitateur

Agitateur

☒ Présence d'un agitateur

☐ Chaleur dissipée incluse

Image



Paramètres

Hélice à 4 pales inclinées

Diamètre du mobile d'agitation	0.5 m
Hauteur du mobile d'agitation	0.015 m
Distance ruban-cuve	0 m
Largeur du ruban	0 m
Nombre de puissance	1.3
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)

Vitesse de rotation par défaut 90 tr/min

Restaurer Technologie OK Annuler

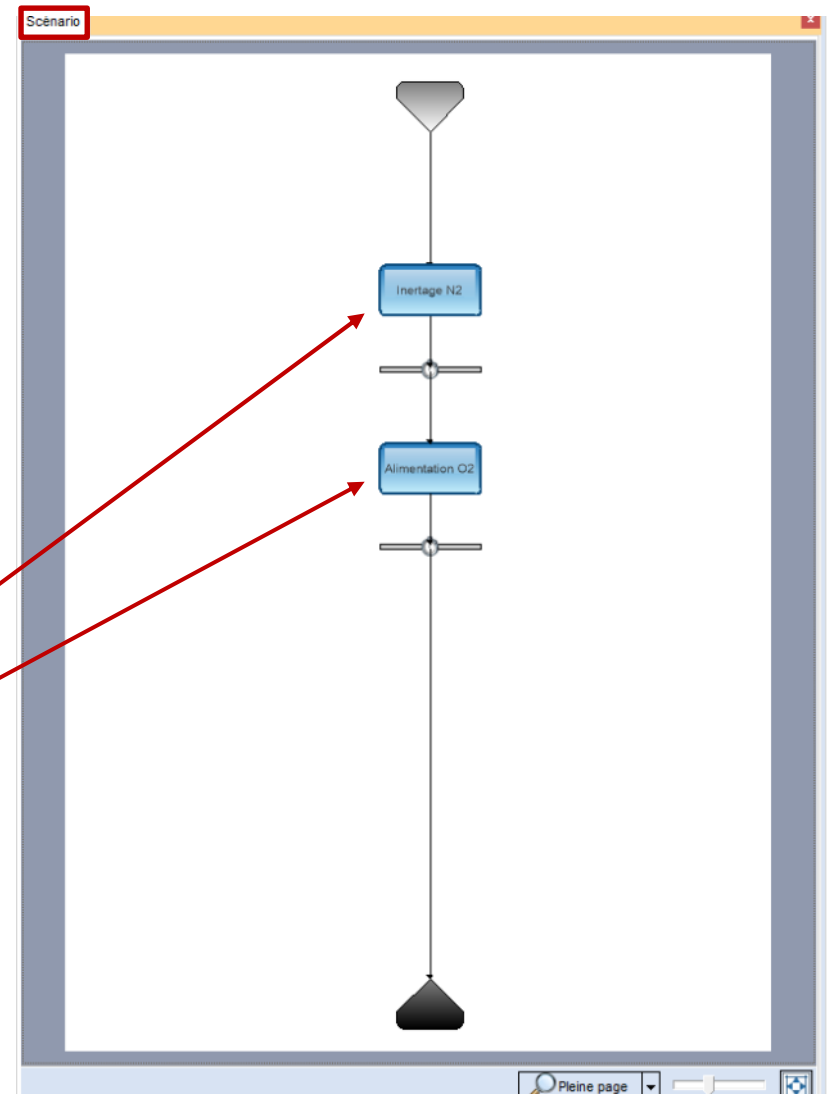
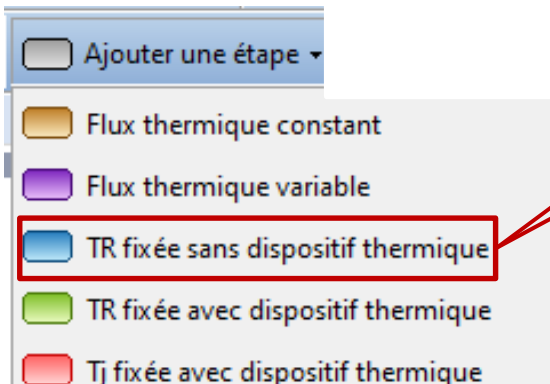
Etape 3 : description du mode opératoire

De retour à l'interface principale, renseignez le mode opératoire au niveau de l'onglet « Scénario »

Le mode opératoire est constitué de deux étapes isothermes :

- *une étape avec une alimentation en azote permettant de stripper l'oxygène initialement présent en phase liquide.*
- *une étape avec une alimentation en oxygène permettant d'analyser l'absorption de l'oxygène en phase liquide.*

1 - Ajoutez deux étapes isothermes et connectez-les



Etape 3 : description du mode opératoire

De retour à l'interface principale, renseignez le mode opératoire au niveau de l'onglet « *Scénario* »

2 - Renseignez les paramètres opératoires de la 1^{ère} étape

Nom de l'étape : Inertage N₂

Alimentation :

flux d'azote pur

T = 22 °C

P = 1 atm

Débit = 354 l/h



Alimentation

Nom : Alimentation

Paramètres Notes Validation

☒ Alimentation ouverte

Spécification de la température

Température donnée 22 °C

Spécification de la pression

Pression donnée 1 atm

Spécification initiale de débit Variation du débit

Fractions Molaire

Constituant	Fraction
WATER	0
OXYGEN	0
NITROGEN	1

1,00000

Débit total volumique 354 l/h

Calculateur thermodynamique Calculateur par défaut

Restaurer OK Annuler

Etape 3 : description du mode opératoire


De retour à l'interface principale, renseignez le mode opératoire au niveau de l'onglet « *Scénario* »


3 - Renseignez les paramètres opératoires de la 2^{ème} étape


 Nom de l'étape : Alimentation O₂

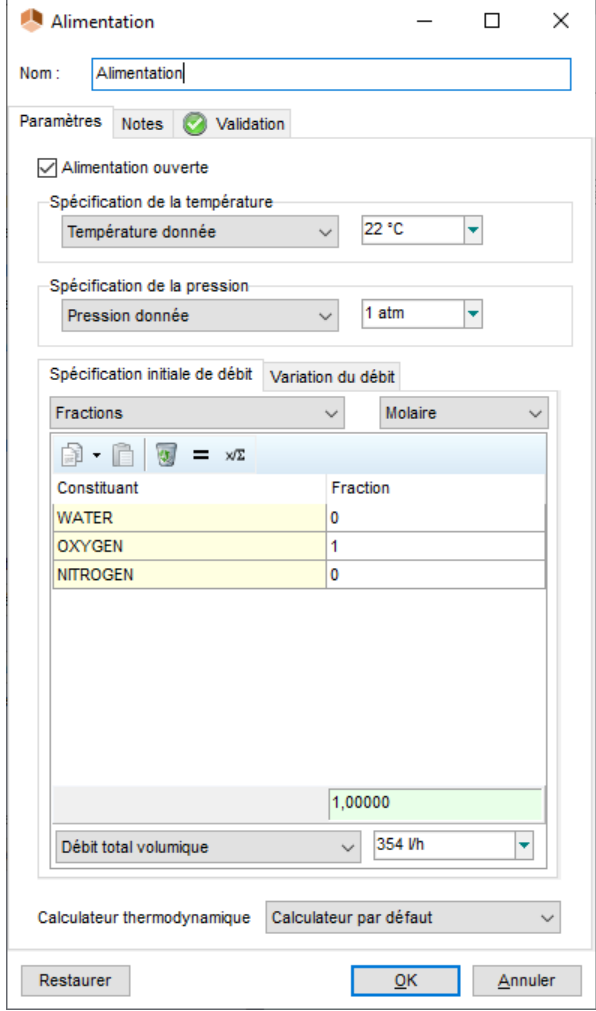
 Alimentation :

 flux d'oxygène pur

 T = 22 °C

 P = 1 atm

 Débit = 354 l/h

The screenshot shows the 'Alimentation' window with the following settings:

- Nom :** Alimentation
- Paramètres** (selected), Notes, Validation
- ☒ Alimentation ouverte
- Spécification de la température :** Température donnée: 22 °C
- Spécification de la pression :** Pression donnée: 1 atm
- Spécification initiale de débit :** Fractions (selected), Molaire
- Tableau des constituants :**

Constituant	Fraction
WATER	0
OXYGEN	1
NITROGEN	0
- Débit total volumique :** 354 l/h
- Calculateur thermodynamique :** Calculateur par défaut
- Buttons: Restaurer, OK, Annuler

Etape 3 : description du mode opératoire

De retour à l'interface principale, renseignez le mode opératoire au niveau de l'onglet « *Scénario* »

4 - Renseignez les événements de fin d'étape

- Pour chaque étape, l'événement de fin correspond à une durée d'étape de 1h



Evènement

Information

Nom : Evènement

Paramètres

Notes

Validation

Type d'évènement

☐ Temps écoulé depuis le début de la simulation
☒ Temps écoulé depuis le début de l'étape
☐ Température dans le réacteur
☐ Fraction dans le réacteur
☐ Concentration dans le réacteur
☐ Charge partielle
☐ Charge totale
☐ Pression dans le réacteur

Paramètre(s) de l'évènement

Temps d'étape

1 h

OK

Annuler

Etape 3 : description du mode opératoire

De retour à l'interface principale, configurez le système d'unités afin qu'il soit cohérent avec les données expérimentales

5 - Modifiez les unités du rapport



- Temps : h
- Température : °C
- Pression : atm
- Concentration massique : mg/L
- ... N'hésitez pas à personnaliser le système d'unités !

6 - Modifiez les paramètres du rapport



- Impression des compositions et débits : massique
- Intervalle de temps pour l'impression : 60s
- Génération du rapport Word®



Paramètres du rapport

Impression des compositions : Massique

Impression des débits : Massique

Intervalle de temps pour l'impression : 60 s

Variables suivies

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

☐ Calcul d'extrapolation

Type de facteur d'extrapolation : Volumique

Facteur d'extrapolation : 2




☒ Génération du rapport (.docx)

☒ Génération des fichiers constituants et réactions

Restaurer OK Annuler

Etape 4 : Simulation de différentes configurations

Les trois configurations suivantes peuvent maintenant être simulées :

-  Configuration 1 : sans résistance au transfert ($k_L a$ infiniment grand)
-  Configuration 2 : avec résistance au transfert et $k_L a$ prédit par le logiciel
-  Configuration 3 : avec résistance au transfert et $k_L a$ obtenu à partir de données expérimentales

Etape 4 : Simulation de différentes configurations

Configuration 1 : sans résistance au transfert ($k_L a$ infiniment grand)

1 - Cliquez sur le bouton « *Transfert de matière* » dans l'onglet « *Procédé* »

Transfert de matière

2 - Sélectionnez l'option « *Pas de résistance* » pour l'ensemble des constituants

3 - Enregistrez le fichier, puis lancez la simulation



Transfert de matière

Coefficients volumiques de transfert de matière

Constituant	Modèle	Valeur
WATER	Pas de résistance	
OXYGEN	Pas de résistance	
NITROGEN	Pas de résistance	

Propriétés de la phase gaz

Phase gaz considérée pour le transfert de matière

☐ Ciel gazeux

☒ Gaz dispersé

% volumique Calculé Gao et al.

Paramètres

Calcul de la puissance dissipée en milieu aéré

Facteur de correction Calculé Bruijn et al.

Paramètres

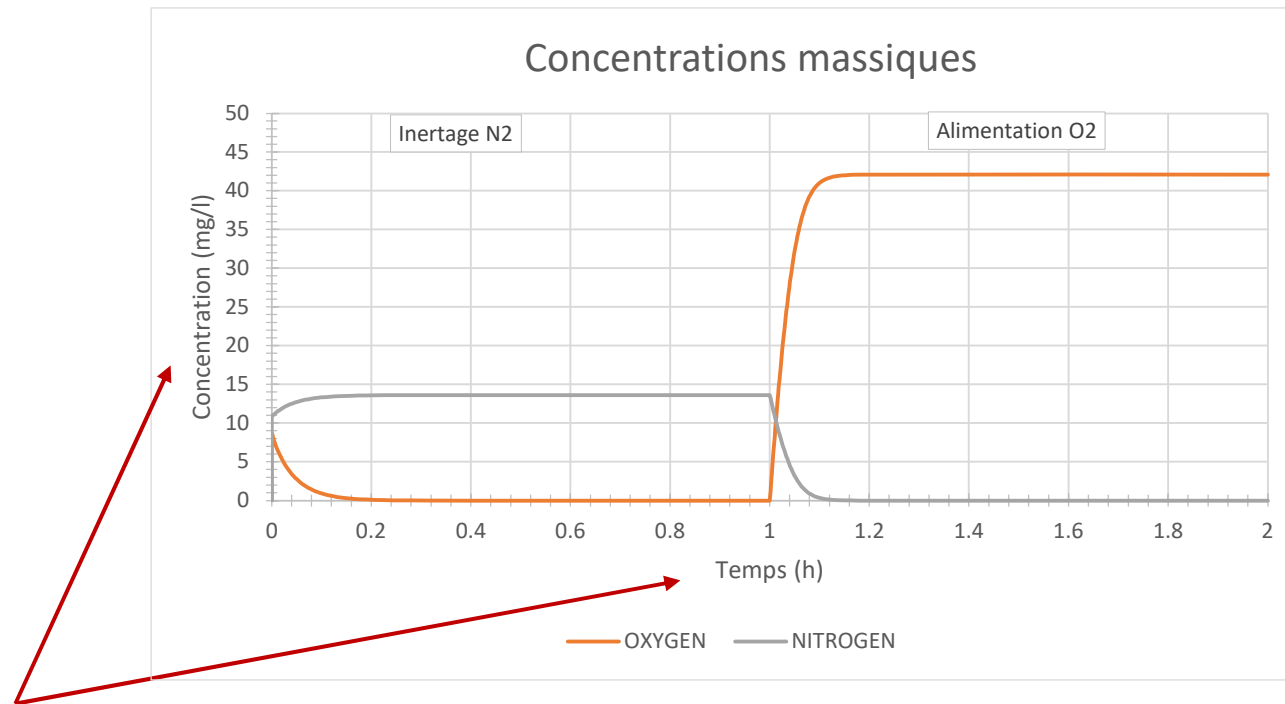
Restaurer OK Annuler

Etape 4 : Simulation de différentes configurations

Configuration 1 : sans résistance au transfert ($k_L a$ infiniment grand)



4 - Une fois la simulation terminée, ouvrez le rapport Word® et accédez au profil des concentrations massiques en phase liquide

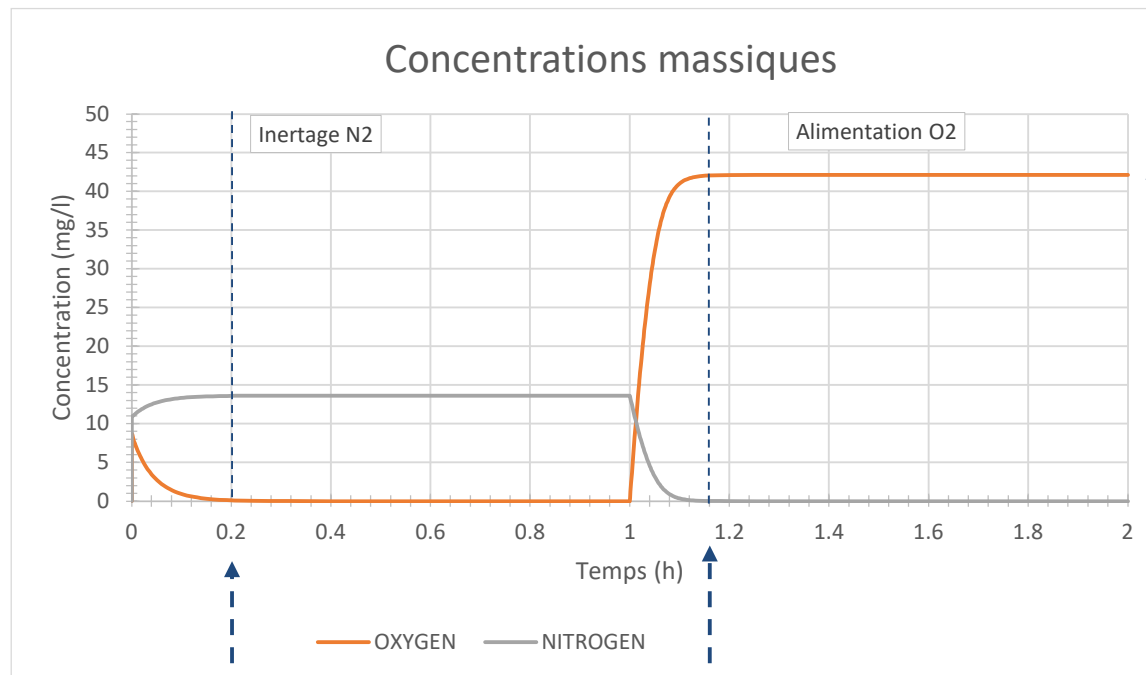


5 - Vous pouvez ajuster l'échelle des axes afin de correctement visualiser les profils de concentration de l'azote et de l'oxygène

Etape 4 : Simulation de différentes configurations

Configuration 1 : sans résistance au transfert ($k_L a$ infiniment grand)

6 - Enfin, analysez les résultats...



Concentration de saturation de l'oxygène dans l'eau : 42 mg/L (pour $P_{O_2} = 1 \text{ atm}$ et $T = 22^\circ\text{C}$)

Temps nécessaire pour stripper l'ensemble de l'oxygène présent en phase liquide

Temps nécessaire pour atteindre la saturation de l'oxygène en phase liquide

Etape 4 : Simulation de différentes configurations

Configuration 2 : avec résistance au transfert et $k_L a$ prédit par le logiciel

1 - Cliquez sur le bouton « *Transfert de matière* » dans l'onglet « *Procédé* »

Transfert de matière

2 - Sélectionnez l'option « *Calculé* » pour l'oxygène (en gardant la corrélation de *Middleton* proposée par défaut)

3 - Enregistrez le fichier, puis lancez la simulation



Transfert de matière

Coefficients volumiques de transfert de matière

Constituant	Modèle	Valeur
WATER	Pas de résistance	
OXYGEN	Calculé	Middleton
NITROGEN	Pas de résistance	

Paramètres de corrélations

Propriétés de la phase gaz

Phase gaz considérée pour le transfert de matière

☐ Ciel gazeux

☒ Gaz dispersé

% volumique Calculé Gao et al.

Paramètres

Calcul de la puissance dissipée en milieu aéré

Facteur de correction Calculé Bruijn et al.

Paramètres

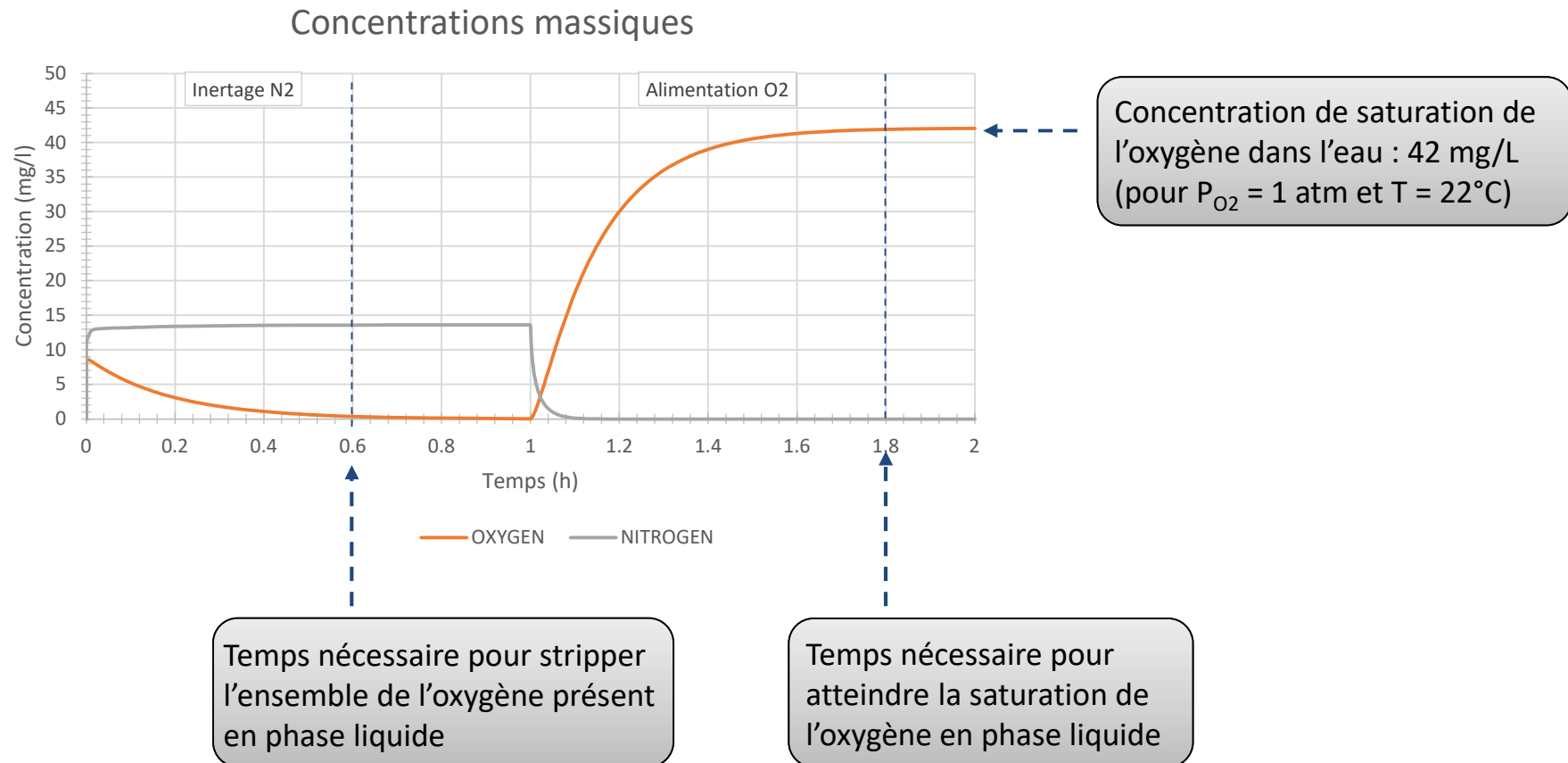
Restaurer OK Annuler

Etape 4 : Simulation de différentes configurations

Configuration 2 : avec résistance au transfert et $k_L a$ prédit par le logiciel

4 - Pour ces conditions opératoires, le $k_L a$ de l'oxygène est prédit à une valeur de **6,8 h⁻¹**.

5 - Analysez l'impact de la résistance au transfert de matière sur les résultats...



Etape 4 : Simulation de différentes configurations

Configuration 3 : avec résistance au transfert et $k_L a$ obtenu à partir de données expérimentales

Le profil de concentration de l'oxygène absorbé en phase liquide a été mesuré par [SAR02] :

Temps (h)	$C_L(O_2)$ (mg/L)
1,01	1,5
1,04	9,6
1,07	15,4
1,11	22,6
1,14	26,9
1,18	30,3
1,22	33,3
1,25	35,2
1,29	37
1,34	38,7
1,40	40,0
1,45	40,6
1,50	41,2

→ Une analyse de sensibilité sur le $k_L a$ de l'oxygène a été effectuée. Une valeur de **$7,6 \text{ h}^{-1}$** a été retenue (en comparaison de **$6,8 \text{ h}^{-1}$** prédit par le modèle)

Etape 4 : Simulation de différentes configurations

Configuration 3 : avec résistance au transfert et $k_L a$ obtenu à partir de données expérimentales

1 - Cliquez sur le bouton « *Transfert de matière* » dans l'onglet « *Procédé* »

Transfert de matière

2 - Sélectionnez l'option « *Fourni* » pour l'oxygène et renseignez un $k_L a$ de **7,6 h⁻¹**

3 - Enregistrez le fichier, puis lancez la simulation



Transfert de matière

Coefficients volumiques de transfert de matière

Constituant	Modèle	Valeur
WATER	Pas de résistance	
OXYGEN	Fourni	7.6 1/h
NITROGEN	Pas de résistance	

Propriétés de la phase gaz

Phase gaz considérée pour le transfert de matière

☐ Ciel gazeux

☒ Gaz dispersé

% volumique Calculé Gao et al.

Paramètres

Calcul de la puissance dissipée en milieu aéré

Facteur de correction Calculé Bruijn et al.

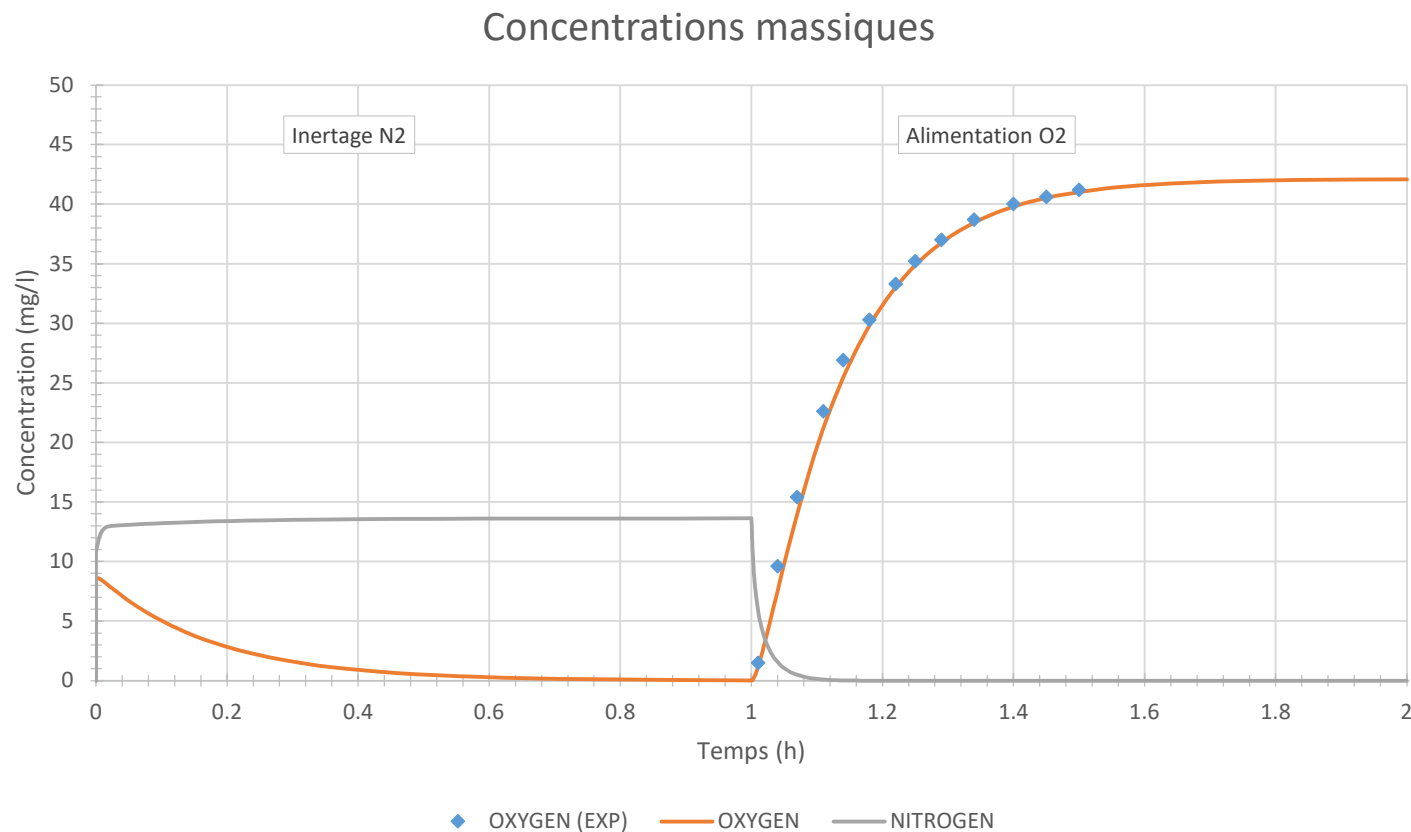
Paramètres

Restaurer OK Annuler

Etape 4 : Simulation de différentes configurations

Configuration 3 : avec résistance au transfert et $k_L a$ obtenu à partir de données expérimentales

4 - Comparez les résultats théoriques (courbe orange) avec les données expérimentales (points bleus)...



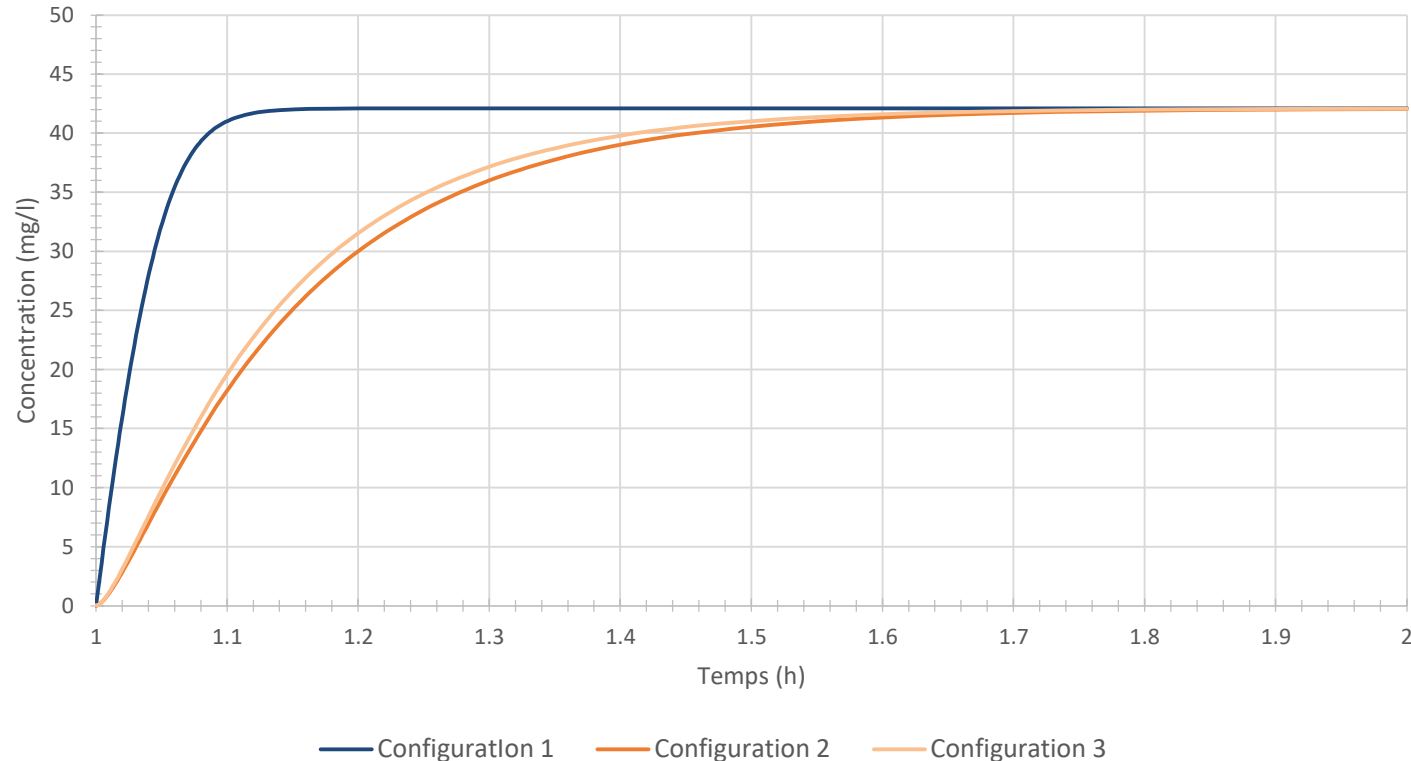
Etape 4 : Simulation de différentes configurations

Pour aller plus loin...



Comparaison des profils obtenus lors de l'étape d'absorption de l'Oxygène, pour les 3 configurations :

Concentrations massiques



Etape 4 : Simulation de différentes configurations

Pour aller plus loin...



Analysez les autres profils

- Profils de composition du gaz et du film liquide
- Coefficients de transfert
- Flux de transfert
- Quantités de chaleur
- ...



Ajoutez des réactions d'oxydation par l'oxygène et analysez l'influence de la résistance au transfert sur le rendement des réactions



Analysez l'influence des paramètres géométriques et des conditions opératoires sur la cinétique de transfert de matière



ProSim SA

51, rue Ampère
Immeuble Stratège A
F-31670 Labège
France

☎: +33 (0) 5 62 88 24 30



Software & Services In Process Simulation

www.prosim.net
info@prosim.net



ProSim, Inc.

325 Chestnut Street, Suite 800
Philadelphia, PA 19106
U.S.A.

☎: +1 215 600 3759