

LIST 



Kneading - Mixing - Drying

**Dimensionner parfaitement
des installations
de production grâce
à la simulation des procédés**

*Comment nous pouvons
vous aider à relever ce défi.*

Simuler des procédés

Comment simuler des procédés complexes mettant en jeu des fluides à viscosité élevée ?

Les procédés durant lesquels des fluides à viscosité élevée sont traités posent des défis majeurs à nos clients. En effet, le comportement spécifique de ces substances reste encore peu étudié dans le génie chimique traditionnel. Il en résulte des risques considérables lors de la mise en œuvre de tels procédés.

C'est là que LIST peut vous apporter son soutien. Depuis de nombreuses années, nous sommes spécialisés dans le mélange et le pétrissage des substances à viscosité élevée. Il est souvent utile ou nécessaire de réaliser une simulation du procédé de malaxage, par exemple afin d'améliorer un procédé existant ou encore de calculer un tout nouveau procédé. La condition préalable est qu'il soit possible de représenter celui-ci par des modèles mathématiques. En tant que pionnier dans ce domaine, nous avons commencé tôt à développer nos propres modèles de procédés de mélange en plusieurs étapes.

Nous utilisons également les découvertes du développement des procédés afin d'améliorer continuellement notre gamme de produits et de l'adapter aux besoins des clients. En fin de compte, nos pétrisseurs doivent correspondre au mieux à vos procédés, et non le contraire. Dans notre centre technique d'Arisdorf près de Bâle (Suisse), nous testons des procédés de pétrissage ambitieux pour nos clients. Cela nous permet d'acquérir des données à partir desquelles nous pouvons développer de nouveaux modèles. Nos données générales sur les substances proviennent d'ouvrages et de bases de données ou encore de nos expériences empiriques en laboratoire.

- > Les données des études pilotes sont généralement des taux d'évaporation, des coefficients de transfert de chaleur ou des temps de réaction.
- > En général, les données provenant d'ouvrages et de bases de données sont des enthalpies spécifiques, des densités ou des enthalpies d'évaporation des solvants ou encore des équilibres thermodynamiques.

Un grand nombre de nos clients souhaitent augmenter leur rendement de production. Ils ont besoin pour cela de réacteurs-malaxeurs plus grands. Afin de déterminer la taille qui convient, nous testons des pétrisseurs de différentes tailles. Les données de ces tests nous permettent de simuler le procédé pour un nouveau pétrisseur et de réaliser une montée en échelle.

La condition préalable est de recueillir suffisamment de données au cours de l'expérience pour pouvoir établir des équations de conservation fiables pour l'énergie et la masse. Ensuite, le modèle permet notamment de calculer de quelle manière le volume du pétrisseur se répercute sur sa performance.



“ Nos pétrisseurs doivent correspondre au mieux à vos exigences, et non le contraire.”

Karsten Güdemann PDG de LIST Technology, ingénieur diplômé.



Pétrisseur de test dans notre laboratoire et montée en échelle agrandie mille fois





LIST Technology Test Center

Montée en échelle ou simulation du procédé ?

Si un procédé peut être calculé de manière simple à l'aide d'une conversion mathématique analytique, on parle alors d'une montée en échelle, et non d'une simulation du procédé. Une montée en échelle peut être calculée en utilisant des programmes simples tels que MS Excel. La simulation des procédés telle que nous la comprenons nécessite en revanche des outils mathématiques ou numériques complexes pour ses calculs. En effet, il est habituel de décrire les bilans de masse et d'énergie au moyen d'un système d'équations différentielles. L'intégration numérique est nécessaire pour la résolution de ce système d'équations. Des propriétés telles que l'équilibre thermodynamique ne sont disponibles que de manière implicite, elles ne peuvent pas être décrites analytiquement. C'est pourquoi des solveurs itératifs doivent être employés.

> Pour ces calculs, nous utilisons le logiciel Mathcad, qui contient ses propres programmes fonctionnels d'intégration numérique.

> En revanche, les itérations numériques pour déterminer plusieurs inconnues ne sont que partiellement possibles avec ce logiciel.

En conséquence, nous avons développé nos propres méthodes basées sur des procédures appelées «méthodes de la sécante».

Deux exemples d'applications pour les simulations des procédés

Dégazer et sécher des solutions

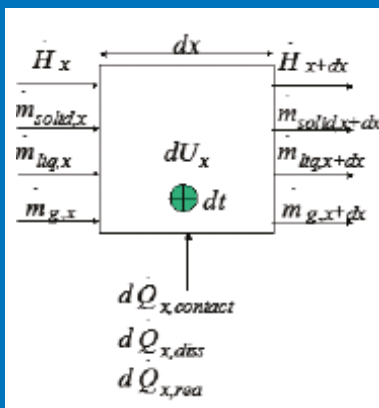
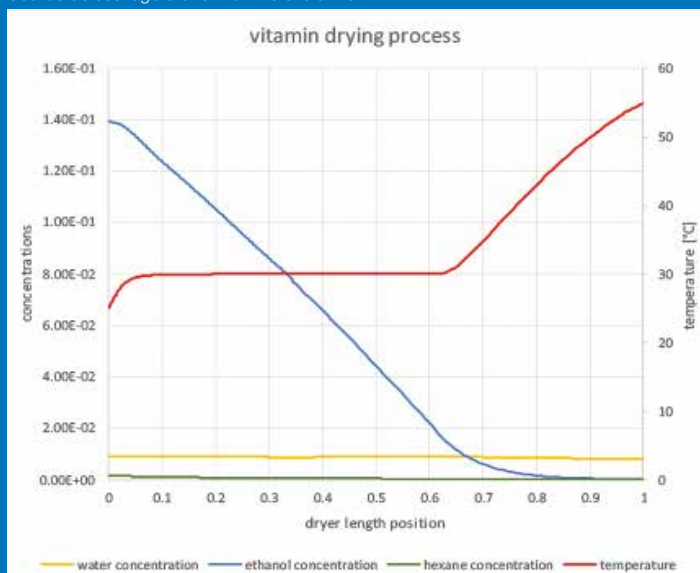
Pour produire du plastique à partir d'une solution de polymère, il faut laisser s'échapper le gaz de la solution. La concentration du plastique augmente continuellement, jusqu'à ce que la totalité du solvant se soit évaporée au cours du procédé de pétrissage. Nous pouvons simuler et prévoir de tels procédés de séchage :

On décrit les différents composants de la solution, par ex. un solvant et son contenu en polymère, à l'état liquide et gazeux. Étant donné que ce procédé est continu dans le pétrisseur, nous pouvons ignorer le facteur temps pour ce calcul. Les conditions du flux de matière que nous faisons entrer dans le pétrisseur sont également connues et constantes. Cela permet de calculer par intégration tout le long de la machine quelle quantité de solvant s'est déjà évaporée à quel endroit. Les flux de matière des phases sont intégrés dans la condition d'équilibre à la frontière entre les phases et les chaleurs de contact et de dissipation de l'agitateur sont insérées dans l'équation énergétique. Cette différentielle donne alors le niveau de température du produit partout dans le réacteur, qui influence d'autre part l'équilibre et le transfert de matière. La manière dont tous les paramètres sont influencés rétroactivement peut être calculée au moyen de procédés itératifs. Comme ceux-ci sont extrêmement complexes, nous avons développé des modèles de calcul particulièrement efficaces à cet effet.

Si le transfert de chaleur détermine le procédé

Au point d'ébullition, on peut constater sous quelles conditions un mélange de substances commence à bouillir et intégrer cela dans l'équation énergétique. Ceci est très utile lorsqu'un liquide ne doit pas s'évaporer complètement, par exemple lors de la production de solvants quand ceux-ci constituent eux-même la matière recyclable. Mais lorsque plusieurs composants volatils sont présents, cette méthode ne fonctionne malheureusement pas. Nous avons donc développé une approche combinée afin de pouvoir mieux comprendre et décrire les procédés de séchage. En effet, ces procédés sont fréquemment déterminés section par section aussi bien par le transfert de chaleur que par celui de masse.

Courbe de séchage d'une vitamine cristalline



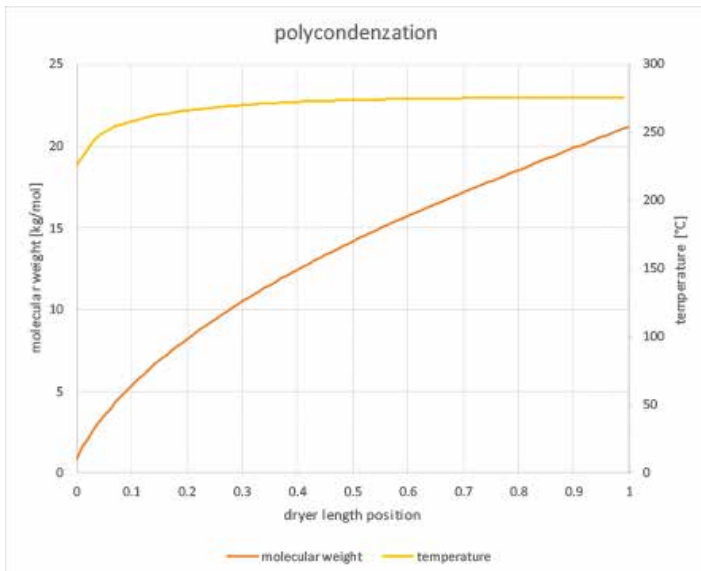
Bilan thermique différentiel sur une section du réacteur

Autres procédés que nous avons pu simuler avec succès :

Procédés de réactions complexes et autres types de procédures

- La polycondensation : il s'agit d'une forme particulière de polymérisation au cours de laquelle un sous-produit volatil apparaît pendant la formation de chaînes, qui doit être détaché par évaporation. Le résultat de ce processus est par exemple le polyamide PA66, un polymère qui sert entre autre à produire des bas en nylon.
- Sur la base de la cascade de cuves agitées, un modèle de procédés avec rétro-mélange, nous avons simulé avec succès une cristallisation à vide d'un additif polymérique.
- La puissance dissipée mécaniquement de l'agitateur peut être décrite en fonction de la viscosité de la substance et du degré de remplissage dans la chambre du réacteur.
- Le profil de niveau de remplissage peut être calculé sur la longueur du réacteur-malaxeur.

C'est avec plaisir que nous vous laissons profiter, chers clients, des résultats de ces simulations.



Evolution du poids moléculaire et de la température lors de la polycondensation de polyamide

La planification d'une installation

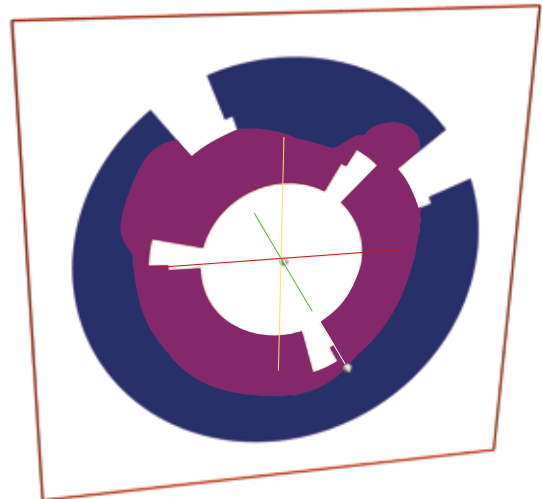
Si l'on veut optimiser un procédé, la difficulté réside moins dans l'amélioration des différents équipements que dans la combinaison adéquate des équipements et des conditions du procédé. Nous calculons ces procédés à l'aide du logiciel commercial ChemCAD. Ce logiciel dispose d'un grand nombre d'opérations standards que l'on peut adapter à ses propres besoins.

> Exemple : pour les solutions de polymères, nous avons rajouté une pré-concentration par vaporisation instantanée et combiné celle-ci au procédé de pétrissage. Nous pouvons ainsi concevoir le procédé de pétrissage bien plus efficacement.

Computational Fluid Dynamics

La mécanique des fluides numérique, aussi appelée Computational Fluid Dynamics (CFD), nous permet de décrire intégralement les rapports des flux dans le réacteur-malaxeur. Dans des chambres de mélange hautement complexes telles que nos pétrisseurs, il n'est pas possible de décrire les phases unitaires des procédés avec de simples relations Reynolds-averaged Navier-Stokes (RANS). Puisqu'il n'existe aucun logiciel commercial adapté aux mélanges de substances à viscosité élevée, nous avons mis un accent particulier sur la recherche en mécanique des fluides numérique depuis de nombreuses années déjà.

En 2018, nous avons pu adapter le premier solveur à itérations pour les systèmes à viscosité élevée dans le logiciel OpenFOAM. Nous continuons de développer ce solveur afin de pouvoir calculer les rapports des flux dans les pétrisseurs. Nous serons ainsi en mesure de comprendre différentes composantes unitaires des procédés telles que le rapport de mélange, la dissipation mécanique ou encore le transfert de chaleur.



Coupe dans un réacteur monoarbre : rouge = phase solide de la substance, bleu = phase gazeuse.

Posez-nous vos questions.

LIST a développé un savoir-faire étendu dans le domaine de la simulation des procédés. Notre but est de pouvoir encore mieux calculer le procédé de pétrissage ainsi que les combinaisons de ce procédé avec des opérations standards.

Pour toute question portant sur un ou plusieurs aspects de la simulation des procédés, **n'hésitez pas à nous contacter.**

LIST Technology AG

Berstelstrasse 23 - 4422 Arisdorf - Switzerland
www.list-technology.com - T: +41 61 815 30 00