Performance de la détection de l'emballement thermique par des critères de sécurité sur différentes cinétiques de réactions

Youssef KOUHILI, Lamiae VERNIERES-HASSIMI, Lionel ESTEL

Université de Rouen Normandie, INSA de Rouen Normandie, LSPC EA4704, 685 avenue de l'Université, 76801 Saint-Étienne-du-Rouvray cedex, France

Introduction

L'emballement thermique est l'un des problèmes majeurs de l'ingénierie des réactions chimiques. Il se produit principalement lors du fonctionnement des réacteurs chimiques avec des réactions exothermiques qui dégagent une grande quantité de chaleur. L'emballement se produit lorsque la capacité de refroidissement du réacteur n'est plus suffisante pour absorber la quantité de chaleur générée par la réaction.

Selon une étude réalisée par (Dakkoune et al., 2019) sur les accidents survenus dans l'industrie chimique française entre 1974 et 2014, l'emballement thermique était responsable de 25% des accidents. Il apparait que la prévention, la détection et le contrôle de cet événement sont cruciaux afin de maintenir une conduite sûre des réacteurs chimiques. Cela peut être fait, par exemple, en appliquant des mesures préventives basées sur l'utilisation de différents critères d'emballement afin de le prédire lors du dimensionnement d'un système. Ces critères peuvent également être appliqués pour la détection des défauts lors de la conduite de réacteurs chimiques avant la perte de confinement.

L'objectif de ce travail est d'étudier et de comparer la détection de l'emballement thermique pour deux systèmes réactionnels lors de la conduite de réacteur en utilisant deux critères d'emballement rapportés dans la littérature.

Détection de l'emballement thermique par des critères de sécurité

La réaction d'oxydation du thiosulfate de sodium par le peroxyde d'hydrogène (R1) et la réaction de perhydrolyse de l'acide formique en acide peroxyformique par le peroxyde d'hydrogène (R2) ont été choisies pour cette étude. Ces deux réactions ont été choisies en raison de leurs cinétiques différentes, la R1 est rapide par rapport à la R2. Chaque réaction a été opérée dans un réacteur fermé dans des conditions isopériboliques.

Le critère de la divergence développé par (Zaldívar et al., 2003) et le critère de (Thomas and Bowes, 1961) ont été choisis pour la détection de l'emballement thermique. Selon (Zaldívar et al., 2003), le réacteur fonctionne sous emballement thermique lorsque la divergence d'une fonction F décrivant le comportement du réacteur devient positive au cours de la réaction (Eq 1).

$$Div\ (F) > 0 \tag{1}$$

Pour (Thomas and Bowes, 1961), l'emballement thermique est défini comme étant la situation où un point d'inflexion apparaît avant le maximum de température dans un plan température-temps. Cette situation est exprimée par les deux conditions suivantes (Eq 2).

$$\frac{d^2T}{dt^2} > 0\ et\ \frac{dT}{dt} > 0 \tag{2}$$

Dans ce travail différents défauts (température de fluide caloporteur, concentration des réactifs, etc.) ont été détectés en utilisant ces critères. La figure 1 présente un exemple de détection de défaut

concernant la température de refroidissement en utilisant le critère de la divergence pour les deux réactions (R1 et R2).

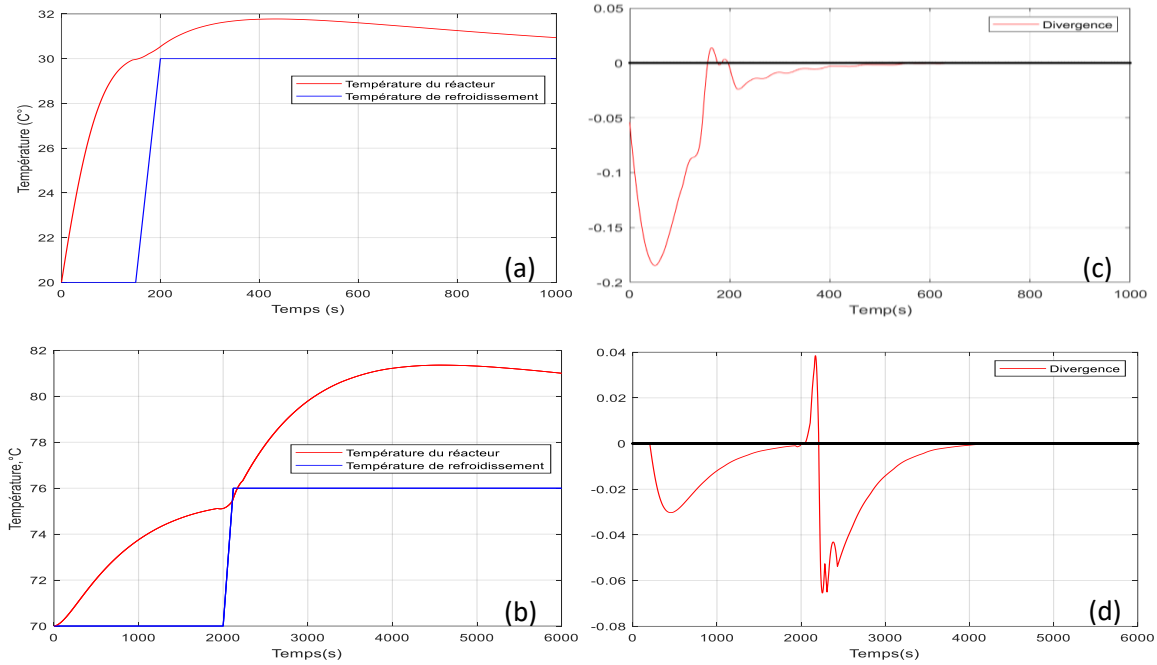

Figure 1 : résultats de simulation des défauts de la température de refroidissement.
(a-b) températures simulées pour la R1 et la R2, respectivement.
(c-d) application du critère de la divergence pour la R1 et la R2, respectivement.

Comme montré figure 1-c, la divergence reste négative au début de la réaction (R1), cette situation selon le critère correspond à un fonctionnement sûr du réacteur. Cependant, après l'apparition du défaut au niveau du système de refroidissement (Figure 1-a), la divergence devient positive. Ce critère montre une bonne détection de ce type de défauts.

Conclusion

Dans ce travail, des simulations de la détection de défauts basées sur l'application de critères ont été menées sur deux réactions de cinétiques différentes dans un réacteur fermé. Les critères appliqués permettent une détection précoce des défauts avant d'atteindre les températures maximales. En perspectives, la détection de l'emballement thermique sera réalisée sur de réacteurs en semi-batch. Une validation des résultats de la simulation par des tests expérimentaux sur un réacteur pilote est également en cours.

Références bibliographiques

Dakkoune, A., Vernières-Hassimi, L., Leveneur, S., Lefebvre, D., Estel, L., 2019. Analysis of thermal runaway events in French chemical industry. Journal of Loss Prevention in the Process Industries 62, 103938.

Thomas, P.H., 1961. Effect of reactant consumption on the induction period and critical condition for a thermal explosion. Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences 262, 192–206.

Zaldívar, J.M., Cano, J., Alós, M.A., Sempere, J., Nomen, R., Lister, D., Maschio, G., Obertopp, T., Gilles, E.D., Bosch, J., Strozzi, F., 2003. A general criterion to define runaway limits in chemical reactors. Journal of Loss Prevention in the Process Industries 16, 187–200.