

DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE



**DE LA RECHERCHE A L'INDUSTRIE**



## **PAREX+ : modélisation et simulation de procédés de chimie séparative extractions liquide-liquide**

| Binh DINH– CEA – Expert technologue

29 novembre 2017 - 11<sup>èmes</sup> RENCONTRES CEA-INDUSTRIE

[www.cea.fr](http://www.cea.fr)

## ■ **Présentation de la technologie :**

- Description technique
- Propriété intellectuelle
- Niveau de maturité

## ■ **Domaines d'applications**

- Nucléaire
- Hors nucléaire

## ■ **Bénéfices et avantages concurrentiels apportés**

## ■ **Offres de services et de partenariat CEA**

# PAREX+ : Présentation de la technologie (1/2)

## ■ Description de l'outil PAREX+

- Le code de calcul PAREX+ est un outil majeur dans le domaine de la chimie séparative. Il permet la modélisation et la simulation des procédés de séparation par la technique de l'extraction par solvant.
- La répartition des espèces d'intérêt dans les phases aqueuse et organique peut être ainsi calculée en tout point du procédé aussi bien en régime établi que dynamique.

## ■ Les principaux phénomènes physicochimiques pris en compte

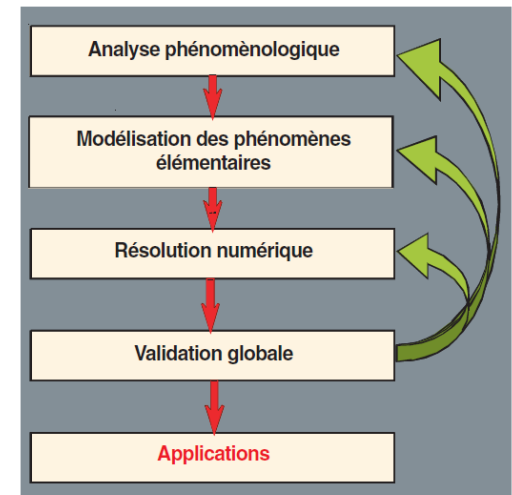
- modélisation des équilibres thermodynamiques d'extraction par le solvant des espèces d'intérêt
- prise en compte de la cinétique du transfert de matière interphase (possibilité de non atteinte de l'équilibre thermodynamique)
- possibilité de prise en compte de la cinétique des réactions chimiques en phase homogène,
- modélisation de l'hydrodynamique des contacteurs pour prendre en compte leur efficacité de transfert
- prise en compte des enthalpies des réactions chimiques, des échanges thermiques avec l'atmosphère ambiante ainsi que les sources de chaleur d'origine mécanique notamment dans le cas des extracteurs centrifuges.

## ■ Propriété intellectuelle ( Brevet, dépôts APP, marques, ...)

- PAREX est détenu en copropriété par le CEA et New Areva. L'objectif est d'étendre le champ d'application du code à d'autres secteurs industriels.

## ■ Niveau de maturité TRL de la technologie

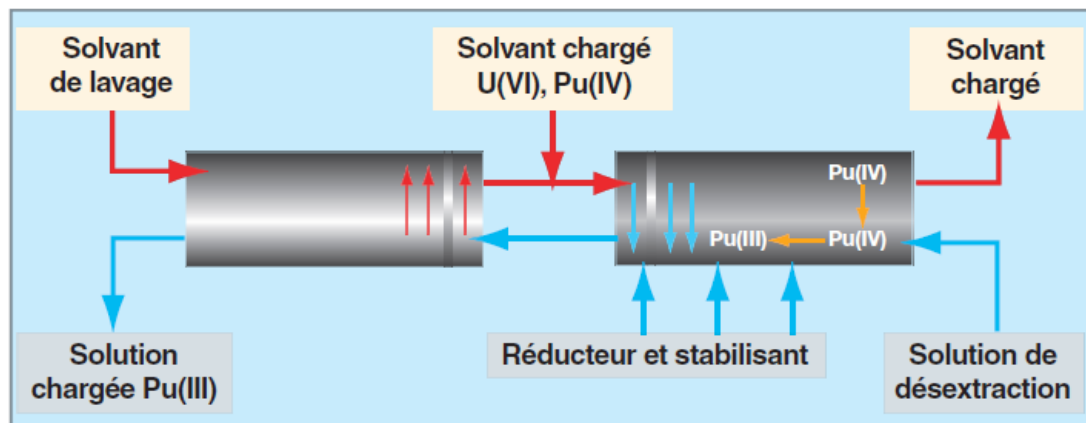
- Dans le cadre du procédé PUREX, le code PAREX a été utilisé avec succès pour la conception des schémas de fonctionnement des ateliers de purification.
- Il a été mis en œuvre de manière exhaustive pour les analyses de fonctionnement des cycles pour les dossiers de sûreté.
- Il est actuellement utilisé en soutien à l'exploitation (évaluation des changements opératoires, aide à la résolution des problèmes relevés en exploitation)



*Etapes de la démarche de modélisation d'un procédé*

# PAREX+ : Domaines d'application

- Tous les domaines où la chimie séparative est mise en œuvre : nucléaire, chimie, pétrochimie, pharmacie, agro-alimentaire, séparation des Terres Rares, hydrométallurgie, ...
- Maitrise de l'extraction liquide-liquide dans le nucléaire:** mise au point d'essais par calcul de la sensibilité des paramètres opératoires et la sélection des paramètres pertinents, correction du schéma et du protocole, validation des modèles via des calculs transitoires
- Simulation de divers procédés d'extraction liquide-liquide** (séparation des Terres Rares) et de procédés de chimie séparative (hydrométallurgie pour l'extraction minière).



*Modélisation de l'opération de partition U/Pu*

# PAREX+ : Bénéfices et avantages concurrentiels apportés

- Méthodologie de développement ayant fait ses preuves et des moyens expérimentaux mobilisables **pour une validation du code produit** (modélisation du système extractant, expérimentation de schéma en micropilote)
- **Implémentation de procédés chimiques complexes** (thermodynamique des équilibres des phases aqueuses organiques par exemple).
- **Calcul de la dynamique de l'évolution des procédés suite à des changements opératoires** : dynamique des phases de démarrage ou d'arrêt, ou lors de mal opération.
- Méthode **de résolution robuste et efficace** (calcul du régime établi d'un cycle de purification du procédé PUREX en quelques secondes)
- Des experts de l'extraction liquide-liquide (DMRC/SPDS) et de la modélisation procédé.

## PAREX+ : Offres de service et de partenariat

- Expertise en chimie séparative et conception de procédés, notamment élaboration de schémas de procédés.
- Implémentation au sein du code PAREX du modèle chimique spécifique du système extractant retenu, et soutien à la mise en œuvre d'un programme expérimental pour le développement et la qualification du code
- Livraison clé en main du code PAREX+ spécifiquement adapté aux procédés de l'industriel et accompagnement/formation nécessaire pour permettre une bonne appropriation de l'outil.

## Contacts CEA Cadarache :

### ■ Binh DINH– CEA – Expert technologue

■ Tél. : 04 66 79 16 37

■ Unité : Dir Opérationnelle/Département/Service

■ Centre :

■ Email : binh.dinh@cea.fr

---

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives  
Centre de Cadarache | 13108 Saint-Paul-Les-Durance cedex  
T. +33 (0)4 42 25 70 00 |

Etablissement public à caractère industriel et commercial | RCS Paris B 775 685 019