

Université Mohamed Khider – Biskra
Faculté des Sciences et de la technologie
Département : Chimie Industrielle



جامعة محمد خيضر بسكرة
كلية العلوم و التكنولوجيا
قسم: الكيمياء الصناعية

Mémoire présentée en vue de l'obtention
Du diplôme de
Master en sciences en : génie des procédés
Option : Génie Chimique

THÈME

Calcul d'une cascade de réacteurs RAC avec
alimentation étagée d'un co-réactif

Présentée par :

Loughraieb Amina

Devant le jury composé de :

Président : Pr BERKAT Djamel

Univ. Biskra

Examineur : Dr. MERZOUGUI Abdelkrim

Univ. Biskra

Encadreur : Dr. BENDJAOUAHDOU Chaouki

Univ. Biskra

Promotion 2020

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

Dédicace

Je dédie ce mémoire :

À mes très chers parents

À Mon frère et mes sœurs

À toute ma famille

À Mes amis

Ainsi qu'à tous mes professeurs, enseignants

Remerciement

Je voulais bien remercier toutes les personnes qui m'ont aidé à réaliser ce travail.

*Je tiens particulièrement à remercier mon encadreur **Mr. BENDJAOUHDOU CHAOUKI** qui m'a beaucoup aidé à réaliser ce travail.*

*Je remercie vivement le président de jury **Mr. BERKAT Djamel**, et l'examineur **Mr. MERZOUGUI Abdelkrim**, qui ont accepté de juger ce travail.*

*En fin, je remercie tous les enseignants de département de chimie industrielle.
Merci a tous.*

Nomenclature

Symbole	Définition	Unité
t_s	Temps de séjour	s
C_j	La concentration molaire de constituant j	mol /m ³
F_j	Débit molaire du constituant A _j	mole /s
τ	Temps de passage	s ⁻¹
C_{A0}	Concentration de A à l'entrée	mol/L
C_{B0}	Concentration de B à l'entrée	mol/L
F	Débit molaires	mol.s ⁻¹
I	Rapport d'inertes	/
K	Constante cinétique de 2 ^{eme} ordre	L/mol.min
Q_{A0}	Débit volumique du réactif A	L/min
Q_{B0}	Débit volumique du réactif B	L/min
V_R	Volume du réacteur	L
V_{RS}	Volume totale de réacteur	m ³ .s ⁻¹
X	Avancement général (taux de conversion)	
X_E	Taux de conversion à l'entrée	/
X_S	Taux de conversion à la sortie	/
X_{AS}	Taux de conversion à la sortie de la cascade	/
Z	Valeur minimale de l'abscisse adimensionnelle à l'entrée	m
Z_{min}	Valeur minimale de l'abscisse adimensionnelle à l'entrée	/
E	Energie d'activation	Jol.mol ⁻¹
r	Vitesse de réaction	mol.m ⁻³ s ⁻¹
t	Temps	s
α	Coefficient d'expansion chimique	/
β	Coefficient de dilatation chimique	/
v_j	coefficient stœchiométrique du constituant A _j	

Liste des figures

Figure	Titre	Page
Figure I.1	Réacteur cuve.....	3
Figure I.2	Réacteur tubulaire.....	3
Figure I.3	Opération continue	4
Figure I.4	Opération discontinue.....	4
Figure I.5	Opération semi-continue.....	5
Figure I.6	Facteurs gouvernant le fonctionnement d'un réacteur chimique.....	10
Figure II.1	Réacteur tubulaire avec alimentation étagée.....	12
Figure II.2	Série de réacteurs RAC avec alimentation étagée.....	14
Figure III.1	Schéma simplifié d'une série de réacteurs agités continus en série avec alimentation étagée en co-réactif B.....	16
Figure IV.1	Variation de de la concentration C_A en fonction du nombre de RAC de la série ($g_{B1}=1/3$; $g_{B2}=1/3$; $g_{B3}=1/3$).....	22
Figure IV.2	Variation de de la concentration C_B en fonction du nombre de RAC de la série ($g_{B1}=1/3$; $g_{B2}=1/3$; $g_{B3}=1/3$).....	23
Figure IV.3	Variation de la concentration C_B en fonction du nombre de RAC de la série dans le cas d'une alimentation normale ou non étagée du co-réactif B ($g_{B1}=1/3$; $g_{B2}=1/3$; $g_{B3}=1/3$).....	24
Figure IV.4	Variation de taux de conversion à la sortie de chaque réacteur en fonction du nombre de RAC de la série ($g_{B1}=1/3$; $g_{B2}=1/3$; $g_{B3}=1/3$).....	25
Figure IV.5	Différentes configuration étudiées de l'alimentation étagée du co-réactif B.....	27

Liste des tableaux

Tableau	Titre	Page
Tableau IV.1.	Influence de l'étagement de l'alimentation du co-réactif B le taux de conversion à la sortie du dernier réacteur de la cascade	26

SOMMAIRE

INTRODUCTION GENERALE	1
CHAPITRE I : GENERALITE SUR LES REACTEURS	
I.1.Introduction	2
I.2. Définition des réacteurs chimiques	2
I.3. Classification des réacteurs chimiques	2
I.3.1. Classification selon le type de réacteur	2
I.3.1.1. Réacteur cuve.....	2
I.3.1.2. Réacteur tube ou réacteur tubulaire.....	3
I.3.2. Classification selon le type d'opération	3
I.3.2.1. Opération continue.....	3
I.3.2.2. Opération discontinue.....	4
I.3.2.3. Opération semi-continue.....	4
I.3.3. Classification des réacteurs selon le type de réaction	5
I.3.3.1. Phase homogène gazeuse.....	6
I.3.3.2. Phase homogène liquide.....	6
I.3.3.3. Phases hétérogènes gaz-solide.....	6
I.3.3.4. Phases hétérogènes gaz-liquide.....	7
I.3.3.5. Phases hétérogènes liquide-liquide.....	7
I.3.3.6. Phases hétérogènes liquide-solide.....	7
I.3.3.7. Phases hétérogènes gaz-liquide-solide.....	7
I.3.3.8 Circulation des phases.....	8
I.4. Facteurs gouvernant le fonctionnement d'un réacteur chimique	9
I.5. Les critères de choix d'un réacteur chimique	10

CHAPITRE II : RÉACTEURS CHIMIQUES AVEC ALIMENTATION ÉTAGÉE

II.1. Introduction	11
II.2. Réacteur piston avec alimentation étagée	11
II.3. Série ou cascade de RAC avec alimentation étagée	14

CHAPITRE III : DESCRIPTION DU PROCÉDÉ ÉTUDIÉ

III.1. Introduction	16
III.2. Présentation du procédé	16
III.3. Modèle mathématique du procédé et procédure de résolution du modèle	17
III.4. Algorithme utilisé dans la simulation	18
III.5. Organigramme utilisé dans la simulation	20

CHAPITRE IV : RESULTATS ET DISCUSSION

IV.1. Introduction	22
IV.2. Variation de la concentration C_A le long de la série de réacteurs RAC.....	22
IV.3. Variation de la concentration C_B le long de la série de réacteurs RAC	23
IV.4. Variation du taux de conversion X_{AS} le long de la série de réacteurs RAC.....	25
IV.5. Influence de l'étagement de l'alimentation du co-réactif b sur le taux de conversion	26
Conclusion générale	28
Références bibliographiques	29

INTRODUCTION GENERALE

Introduction générale

Une des branches importantes du génie des procédés est le génie de la réaction chimique qui s'intéresse aux méthodes de mise en œuvre rationnelles des réactions chimiques et en particulier aux appareils dans lesquels sont conduites ces opérations : les réacteurs chimiques. Le réacteur chimique a un rôle très important et incontournable dans l'industrie chimique. Il existe plusieurs types de réacteurs chimiques, et l'un des plus utilisés est le réacteur étagé formé d'une série ou cascade de plusieurs réacteurs continus agités (RAC).

Dans ce mémoire nous allons étudier par simulation au moyen du logiciel Matlab l'influence de plusieurs paramètres opératoires sur le fonctionnement d'une série de réacteur de type RAC ayant une alimentation étagée d'un co-réactif. On étudiera l'influence de la répartition de l'alimentation étagée du co-réactif pour optimiser le fonctionnement du procédé considéré (série de RAC). Les résultats trouvés devraient nous permettre de savoir comment devraient être la répartition de l'alimentation étagée du co-réactif pour optimiser la capacité de production du procédé, c'est-à-dire avoir un taux de conversion maximale à la sortie de la série de réacteurs.

Le travail réalisé, outre l'introduction et la conclusion générale se divise en quatre chapitres dont le premier concerne les généralités sur le réacteur chimique, le second chapitre traite de l'étude des réacteurs avec alimentation étagée, le troisième chapitre est relatif à la description du procédé étudié et le quatrième chapitre est enfin consacré à la discussion des résultats obtenus par simulation. Enfin, une conclusion générale clôturera ce travail et mettra en relief les points forts établis.

CHAPITRE I

GÉNÉRALITÉS SUR LES RÉACTEURS

CHAPITRE I : GÉNÉRALITÉS SUR LES RÉACTEURS

I.1. INTRODUCTION

Le réacteur chimique est l'équipement siège des réactions chimiques, il a un rôle très important et incontournable dans l'industrie chimique. La nature des réactifs et des produits et la réaction chimique qui aura lieu imposent le type de réacteur à choisir. Ce chapitre est consacré à l'étude des classifications des réacteurs du point de vue classification et comparaison [1].

I.2. DEFINITION DES RÉACTEURS CHIMIQUES

Le réacteur est un appareil permettant de réaliser une réaction chimique, c'est-à-dire la transformation de produits de caractéristiques données en d'autres produits de caractéristiques et propriétés différentes. Il est à la fois le siège de phénomènes chimiques et de phénomènes physiques; ces derniers se divisent en deux catégories : les phénomènes physiques à dominante hydrodynamique (écoulements monophasiques ou polyphasiques, création et suppression d'interface entre phases, etc.) et les phénomènes physiques à dominante cinétique relevant de la science des transferts, soit à l'intérieur d'une phase (homogénéisation des concentrations et des températures), soit entre phases (dissolution d'un gaz dans un liquide) [1]. Enfin, il importe de rappeler que le réacteur peut être le siège d'une réaction chimique (réacteur chimique), biochimique ou biologique (bioréacteur), électrochimique (électrolyseur), nucléaire (réacteur nucléaire) et même photochimique (photoréacteur).

I.3. CLASSIFICATION DES RÉACTEURS CHIMIQUES

L'union réacteur-réaction chimique va être principalement conditionnée par trois facteurs spécifiques, à savoir le réacteur, l'opération et le type de réaction.

I.3.1. Classification selon le type de réacteur

Actuellement, il est considéré qu'il y a deux types fondamentaux de réacteur industriel. Ce sont la cuve et le tube.

I.3.1.1. Réacteur cuve

Le réacteur est un récipient où les trois dimensions sont comparables (FIG.I.1). Il est presque toujours muni d'un dispositif qui assure une agitation du mélange réactionnel. Le rapport surface sur volume n'est pas très grand [2].

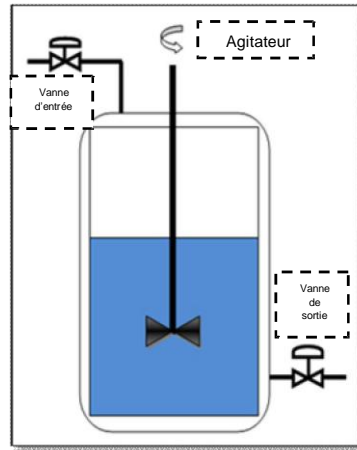


FIG.I.1. Réacteur cuve [1].

I.3.1.2. Réacteur tube ou réacteur tubulaire

Le réacteur est un tube caractérisé par une certaine longueur où le mélange réactionnel se déplace à la manière d'un piston. (FIG.I.2). Le rapport surface sur volume est assez grand [1].

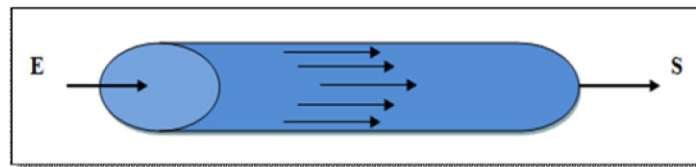


FIG.I.2. Réacteur tubulaire [1]

I.3.2. Classification selon le type d'opération

Il est reconnu qu'un réacteur peut fonctionner selon trois sortes d'opérations, à savoir :

- opération continue ;
- opération discontinue ;
- opération semi-continue.

I.3.2.1. Opération continue

Les appareils fonctionnant en continu, qualifiés de systèmes ouverts, sont dotés d'une ou plusieurs entrées pour introduire les réactifs, et d'une ou plusieurs sorties par lesquelles les produits de la transformation sont évacués (FIG.I.3). Le système continu est généralement

conçu pour travailler en régime stationnaire [1].

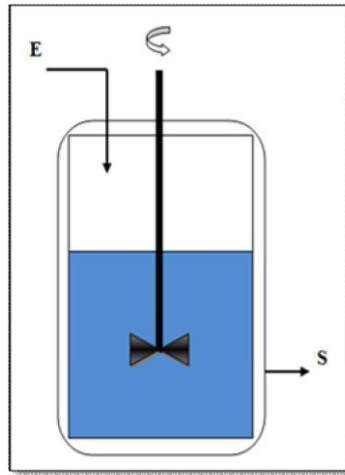


FIG.I.3. Opération continue [1]

I.3.2.2. Opération discontinue

On qualifie parfois ces appareils de systèmes fermés, car durant le laps de temps pendant lequel la réaction se déroule il n'y a pas de flux de matière entrant ou sortant du système (FIG.I.4). Ce type d'appareil a la faveur des industriels pour les opérations jugées très délicates et les petites productions [1].

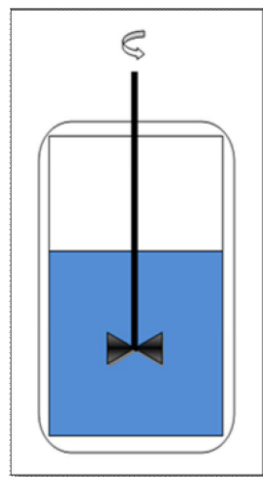


FIG.I.4. Opération discontinue [1].

I.3.2.3. Opération semi-continue

Une opération est dite en semi-continu lorsqu'il y a chargement des matières premières et vidange de l'appareil de manière périodique, mais il y a évacuation continue d'un produit ou sous-produit de telle sorte que pendant une période relativement longue, on peut rajouter de nouvelles quantités de matières premières (FIG.I.5). La marche du réacteur en semi-continu

ne diffère de la marche en discontinu que par les appareils annexes [1].

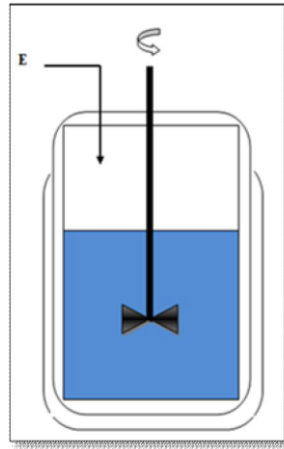


FIG.I.5. Opération semi-continue [1]

Remarque : Il faut préciser que chaque fois qu'un gaz est en jeu, l'opération sera très certainement continue pour des raisons pratiques. Un gaz a une faible masse spécifique ce qui entraînerait un grand volume pour une opération discontinue pratiquement non rentable industriellement.

I.3.3. Classification des réacteurs selon le type de réaction

Parmi les réactions chimiques industrielles, il existe sept grandes espèces de réactions. Les réactions peuvent se dérouler totalement en phase vapeur ou liquide, et il est alors dit que la réaction a lieu en phase homogène. Si les réactions se déroulent dans deux ou plusieurs phases, c'est-à-dire des combinaisons entre les phases vapeur, liquide(s) et solide(s), alors les réactions se déroulent en phase hétérogène [1-3].

Les réactions homogènes se produisent uniformément dans le volume, ce qui rend plus aisés les transferts de matière. Le problème se situe dans les réactions fortement exothermiques, le contrôle de la température risque de poser des problèmes de transfert de chaleur. Ces réactions ne sont pas très répandues dans l'industrie, sauf si cela se passe en phase gazeuse [1-3].

Les réactions hétérogènes se produisent dans un petit volume bien déterminé, d'ailleurs lié à l'hétérogénéité du milieu (le contact des réactifs n'est possible qu'à l'interface entre les phases. Ceci rend les transferts de matière et aussi de chaleur encore beaucoup plus cruciaux et délicats [1-3].

I.3.3.1. Phase homogène gazeuse

Ces réactions sont toujours réalisées dans des réacteurs tube (un ou plusieurs) fonctionnant en continu. Le diamètre du tube est de l'ordre du cm (ou dm) et sa longueur varie d'un mètre à plusieurs dizaines de mètres. Le débit est assez élevé pour que l'écoulement soit turbulent (donc bien mélangé localement), la température et la pression sont généralement élevées. Un exemple industriel est donné par le craquage thermique de fractions pétrolières en éthylène ou l'isomérisation de composés organiques [1-3].

I.3.3.2. Phase homogène liquide

Ces réactions sont réalisées dans un réacteur cuve en opération discontinue ou continue. Le volume du réacteur peut varier de quelques litres à quelques dizaines de milliers de litres. Il est aussi possible d'utiliser des réacteurs tube pour des raisons pratiques de mise en œuvre. En tout cas, si la réaction est très rapide et exothermique et que le liquide est plutôt visqueux, le réacteur cuve doit plutôt s'imposer car une bonne agitation à l'intérieur peut assurer un bon transfert de chaleur. Un exemple industriel est donné par la polymérisation du styrène (polymérisation en masse) [1-3].

I.3.3.3. Phases hétérogènes gaz-solide

Ces réactions impliquent un ou plusieurs solides comme catalyseurs ou comme réactifs, avec un ou plusieurs gaz. L'opération sur le gaz sera nécessairement continue et dans des réacteurs tube, tandis que pour la phase solide, elle pourra être continue ou discontinue. Ces types de réactions sont présents dans 80 % des cas de la chimie industrielle. Il faut cependant distinguer trois types de couplage réacteur-réaction :

- le réacteur est tubulaire à lit solide fixe, dans ce cas, le solide joue surtout le rôle de catalyseur (lit de grains solides de quelques mm, parfois des toiles métalliques). Une caractéristique de cet appareil est la faible conductibilité thermique du lit granulaire, ce qui peut être gênant dans le cas des réactions exothermiques. Par contre, si le solide est lui-même un réactif, on utilisera moins ce genre de réacteur à cause justement de la manipulation du solide (à fixer dans des petits tubes). Des exemples industriels sont donnés par les synthèses de l'ammoniac, du méthanol, de l'oxyde d'éthylène [4-5] ;
- Le réacteur est à lit solide fluidisé, le solide, composé de granulés de quelques microns, est mis en suspension (en état fluidisé) par le gaz ascendant. Le tube peut avoir une hauteur de plusieurs mètres.

Par son état de fluidisation, le solide se comporte comme un pseudo liquide, ce qui lui confère de meilleures propriétés de transfert thermique que s'il était fixe, plus la possibilité de traiter le solide en continu. Des exemples industriels sont donnés par le craquage catalytique et les opérations de métallurgie sèche [4-5].

- Le réacteur est à lit mouvant, le solide, sous forme de lit granulaire, se déplace vers le bas par gravité. Ce type de réacteur est parmi les réacteurs les plus difficiles à maîtriser et à étudier. Un exemple industriel est donné par le haut-fourneau de métallurgie [4-5].

I.3.3.4. Phases hétérogènes gaz-liquide

Ces réactions se déroulent dans des réacteurs tube ou cuve. Le gaz (en opération continue) sera dispersé sous forme de bulles dans la phase liquide ou bien au contraire, le liquide sera dispersé dans la phase gazeuse.

Un exemple industriel est la chloration du benzène dans un réacteur tubulaire à bulles ou encore l'enlèvement du CO₂ d'un gaz par une solution basique dans une tour d'absorption à garnissage [4-5].

I.3.3.5. Phases hétérogènes liquide-liquide

Ces réactions peuvent se réaliser dans des réacteurs tube ou cuve, en opération continue ou discontinue par rapport à chacune des deux phases. Un exemple industriel est la nitration du toluène par les acides nitrique et sulfurique dans un réacteur continu à cuve [4-5].

I.3.3.6. Phases hétérogènes liquide-solide

Ces réactions peuvent se réaliser dans des réacteurs tube ou cuve, en opération continue ou discontinue par rapport à chacune des deux phases. Un exemple industriel est donné par les nombreuses réactions de la métallurgie humide (fabrication de l'aluminium par traitement de bauxite par la soude caustique) [4-5].

I.3.3.7. Phases hétérogènes gaz-liquide-solide

Quoique plus complexes au point de vue des divers transferts, ces réactions sont assez répandues dans l'industrie. Le solide en lit fixe granulaire sert pratiquement toujours de catalyseur. Le gaz et le liquide circulent généralement à contre-courant. Un exemple industriel est donné par l'hydrodésulfuration de pétrole ou par l'hydrogénation de l' α -méthylstyrène en cumène [4-5].

I.3.3.8 Circulation des phases

De la même façon que pour les appareils de séparation, on a le choix entre divers modes de circulation des phases : à contre-courant, à courants parallèles ou à courants croisés. Le rôle primordial joué par la transformation chimique fait que l'arrangement à contre-courant n'est pas forcément optimum, comme dans le cas d'un processus purement physique. C'est pour cette raison aussi que la rétention des phases, en particulier celle de la phase réactionnelle, se révèle être un paramètre important lors de l'étude d'un réacteur polyphasique. Il faut enfin remarquer que pour les systèmes polyphasiques, le type d'écoulement associé à chacune des phases n'est pas forcément le même pour toutes. On peut ainsi imaginer un système gaz-liquide pour lequel la phase liquide serait parfaitement agitée alors que la phase gazeuse aurait un écoulement du type tubulaire (cas d'un fermenteur par exemple [6]). Dans les milieux hétérogènes, les transferts de matières et de chaleur au niveau moléculaire devront être suffisamment accélérés (agitation, débit suffisant, granulométrie appropriée), afin qu'ils ne ralentissent pas la réaction chimique elle-même. Le choix entre un réacteur cuve (réceptif) et un réacteur piston (long tube) dépend de plusieurs critères.

Le type de phase à traiter est un premier critère, les tubes conviennent mieux pour les gaz que les cuves (les transferts de chaleur par un gaz ne sont guère favorisés), tandis que les cuves conviennent mieux aux liquides (les pertes de charge risquent d'être plus élevées dans un tube parcouru par un liquide).

Pour les réactions en phase hétérogène, le choix dépendra des phases en présence et surtout de la phase qui va assurer essentiellement le transfert de chaleur. Cela va aussi dépendre de l'exothermicité ou de l'endothermicité de la réaction. Les transferts de chaleur sont inévitablement déterminants dans le choix du type de réacteur. S'il faut évacuer ou amener de la chaleur rapidement, il faut un réacteur où le rapport surface sur volume soit assez grand comme dans le cas du tube de petit diamètre [7].

-Si on reconnaît que le réacteur chimique est d'abord conçu en fonction de la transformation de matière, il ne faut tout de même pas perdre de vue l'aspect thermique, ce qui veut dire que le réacteur doit aussi être adapté à la capacité de transférer la chaleur efficacement en vue d'assurer sa stabilité [7].

I.4. FACTEURS GOUVERNANT LE FONCTIONNEMENT D'UN RÉACTEUR CHIMIQUE

La figure I.6 indique, sous forme d'un schéma systémique, les principaux facteurs gouvernant le fonctionnement d'un réacteur chimique. Ce sont d'abord les données physico-chimiques sur la nature des transformations mises en jeu : vitesse des réactions, thermicité, présence d'équilibres, influence de la pression, de la température, de l'état de dilution sur ces paramètres. Ce sont ensuite les données hydrodynamiques sur l'écoulement des phases et leur mode de mélange et de mise au contact [1].

L'hydrodynamique est à son tour étroitement liée aux phénomènes de transfert et de transport de chaleur, de matière et de quantité de mouvement qui accompagnent les réactions. Les données de transfert à l'intérieur d'une phase, entre phases ou entre les mélanges réactionnel et la paroi du réacteur, relevant de la cinétique physique, jouent un rôle aussi important que les vitesses de transformations proprement dites, qui sont du domaine de la cinétique chimique ou biologique [8].

Tous les facteurs que nous venons d'énumérer concourent à relier l'ensemble des paramètres opératoires (nature des espèces chimiques entrant dans le réacteur, pression, température, concentrations, débits et temps de séjour des phases) à l'ensemble des résultats de l'opération (taux de conversion des réactifs, nature et distribution des produits, rendements matériels et énergétiques). Suivant le point de vue auquel on se place, ces relations sont utilisées dans des sens différents. Le chercheur qui étudie une transformation s'efforce de maîtriser les conditions opératoires, la structure du réacteur et l'hydrodynamique. Dans tous les cas il est nécessaire de connaître les relations qui existent entre tous les facteurs gouvernant le fonctionnement du réacteur (Fig. I.6).

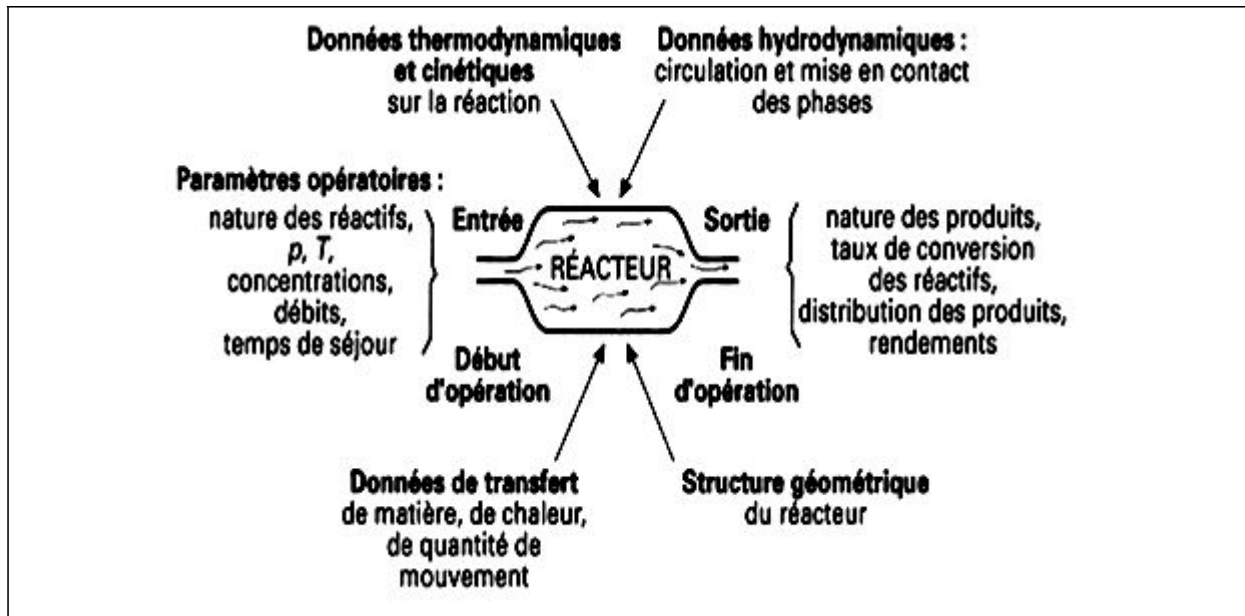


FIG. I.6. Facteurs gouvernant le fonctionnement d'un réacteur chimique [1].

I.5. LES CRITERES DE CHOIX D'UN RÉACTEUR CHIMIQUE

Pour concevoir le meilleur réacteur possible pour réaliser une réaction donnée, il faut d'abord choisir le ou les facteurs que l'on a intérêt à privilégier, qui peuvent être [8]:

- le taux de conversion d'un réactif donné ;
- le rendement en produit cherché, c'est-à-dire la sélectivité dans le cas très fréquent où la réaction cherchée est accompagnée d'une ou de plusieurs réactions parasites. la recherche de cette sélectivité peut en effet amener à se contenter d'un faible taux de conversion, surtout si les réactifs sont faciles à isoler des produits de la réaction en vue de leur recyclage ;
- la minimisation de la formation d'une impureté très difficile à séparer, ou susceptible de créer des problèmes (pour la sécurité, l'environnement) ;
- la minimisation du volume global, autrement dit la maximisation de la capacité de production, ou la minimisation des investissements ;
- la sécurité du fonctionnement ;
- la qualité du produit obtenu ;
- la nature des réactifs et des produits de la réaction. Le réacteur ne peut en effet être le même selon qu'il s'agit d'une réaction en milieu homogène entre gaz ou entre liquides, ou d'une réaction entre deux phases liquides, entre un gaz et un liquide, entre des liquides mais avec production d'un gaz, et aussi entre des solides fondus.

CHAPITRE II

RÉACTEURS CHIMIQUES AVEC ALIMENTATION ÉTAGÉE

CHAPITRE II : RÉACTEURS CHIMIQUES AVEC ALIMENTATION ÉTAGÉE

II.1. INTRODUCTION

Dans ce chapitre on va présenter les différents cas d'utilisation de l'alimentation étagée d'un réactif dans les réacteurs chimiques.

II.2. RÉACTEUR PISTON AVEC ALIMENTATION ÉTAGÉE

Soit V_{RS} le volume totale de réacteur et plançons-nous au volume courant V_R (Fig II.1). Par hypothèse le flux d'alimentation F_{j0} de chaque constituant A_j est répartie le long de l'axe selon une fonction de distribution g_j telle que $g_j F_{j0}$ représente la quantité de A_j déjà introduite dans le réacteur entre l'entrée et le point par le volume V_R . V_{RS} étant le volume total de réacteur, Introduisons le paramètre de progression axiale $z = V_R / V_{RS}$. La loi d'étagement d'alimentation pour chaque constituant A_j, A_1, \dots est ainsi représentée par $g_j(z), g_1(z)$ dans un diagramme carré, chacune des variables g_j et z étant comprises entre 0 et 1. La quantité de A_j introduite entre V_R et $V_R + dV_R$ est $dF_{jE} = F_{j0} dg_j$.

Il est alors facile d'écrire le bilan de A_j entre V_R et $V_R + dV_R$:

$$F_j + dF_{jE} + v_j r dV_R = F_j + dF_j \quad (\text{II.1})$$

$$X_{k-1} = X_k - \frac{r_k V_R}{c_0} = X_k - f(X_k) \quad (\text{II.2})$$

Soit par définition de l'avancement X de la réaction au point V_R , nous posons :

$$F_j = g_j F_{j0} + v_j F_0 X \quad (\text{II.3})$$

Le premier terme représente la quantité déjà introduite et le second la quantité produite (ou consommée) par la réaction, et $F_0 = \sum_j F_{j0}$.

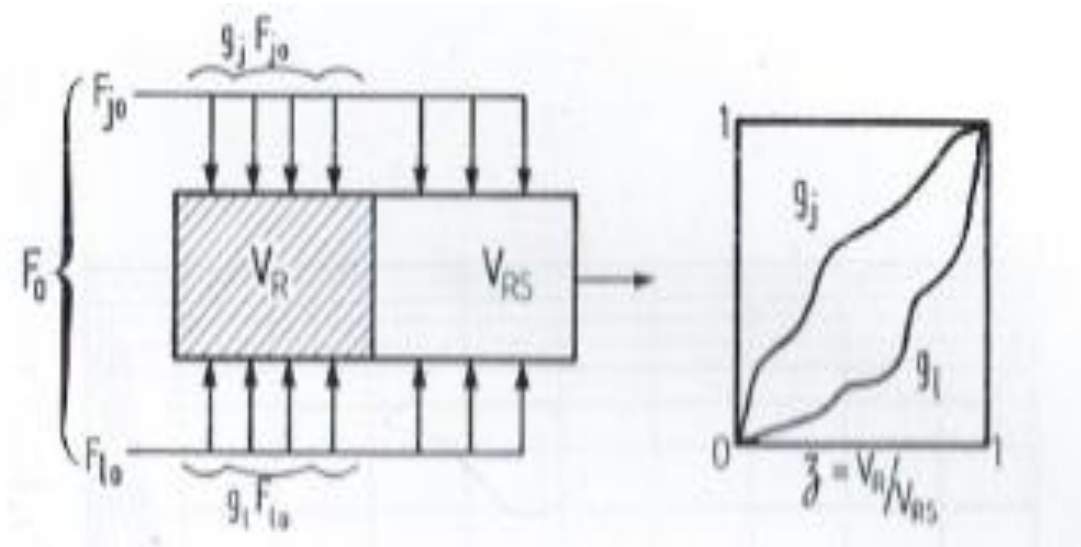


FIG II.1. Réacteur tubulaire avec alimentation étagée [9].

A partir de (II.1) et (II.3), on obtient une équation de bilan formellement identique à celle du réacteur piston avec alimentation à l'entrée :

$$\frac{dX}{dV_R} = \frac{r}{F_0}$$

Ou encore

$$\frac{dX}{dV_R} = R(X, z) \tag{II.4}$$

Ou l'on a posé :

$$R = r \frac{V_{RS}}{F_0} = \frac{rt}{C_0} \tag{II.5}$$

Mais la différence est que R dépend cette fois explicitement de X et de la position z, car les concentrations varient simultanément sous l'effet de la réaction et l'addition des réactifs [9].

1. Réaction en phase gazeuse parfaite

La concentration C_j peut s'exprimer par $C_j = \frac{F_j}{Q}$; le débit local Q est tel que :

$$\frac{PQ}{P_0 Q_0} = \frac{F + F_1}{F_0 + F_1}$$

Ou $F = \sum F_j$ est le flux local d'actifs et F_i le flux d'inertes. A partir de ces expressions et de (II.2) on obtient :

$$C_j = \frac{C_o (g_j y_{j0} + v_j)}{\beta \sum_j g_j y_{j0} + X \Delta v} \quad (\text{II.6})$$

Ou les $g_j(z)$ sont des données traduisant l'étagement des alimentations. Cette expression est générale mais on voit que le coefficient de dilatation chimique $\alpha = \Delta v(1+I)^{-1}$ n'intervient pas directement ici par suite des apports en cours de réaction. (II.3) montre que les C_j s'expriment en fonction de X , de z (par les g_j), des conditions physiques Locales (par β) et des données initiales. la substitution des C_j dans la loi de vitesse r fournit la fonction $R(X, z)$ et permet de calculer X_s par résolution de l'équation différentielle (II.4) entre $z=0$ ($X=X_E$) et $z=1$ ($X=X_s$) [9].

2. Réaction en phase condensée (par exemple liquide)

Négligeons les dilatations physique et chimique du mélange réactionnel. la fonction d'étagement g_j qui concerne au départ le débit molaire (ou massique) s'applique aussi dans ce cas à l'étagement de débit volumique du courant de liquide contenant chaque constituant A_j . Soit Q_{j0} le débit totale introduit. au point V_R , on a déjà injecté $Q_j = g_j Q_{j0}$ et le débit local est $Q = \sum_j Q_j = \sum_j g_j Q_{j0}$.

D'où la concentration :

$$C_j = \frac{F_j}{Q} = \frac{g_j F_{j0} + v_j F_o X}{\sum_j g_j Q_{j0}} \quad (\text{II.7})$$

On peut donner diverses formes à cette expression, par exemple en introduisant les fractions de débit volumique :

$$q_{j0} = \frac{Q_{j0}}{Q_o}$$

$$C_j = C_o \frac{g_j y_{j0} + v_j X}{\sum_j g_j q_{j0}} \quad (\text{II.8})$$

Ou encore les concentrations C'_{j0} dans les courants d'alimentation avant mélange :

$$C_j = \frac{C'_{j0} q_{j0} y_{j0} + v_j (\sum_j C'_{j0} q_{j0}) X}{\sum_j g_j q_{j0}}$$

Ou l'on rappelle que :

$$F_{j0} = C'_{j0} Q_{j0} = C_{j0} Q_0 = y_{j0} F_0 \quad (\text{II.9})$$

L'une quelconque de ces expressions $C_j(X, z)$ permet la résolution de l'équation de bilan (II.4).

II.3. SERIE OU CASCADE DE RAC AVEC ALIMENTATION ÉTAGÉE

Soit une série ou cascade de réacteurs agités continus (RAC) ayant en général des volumes inégaux. On suppose que chaque constituant A_j est introduit d'une manière étagée selon la fonction d'étagement g_{jk} telle que $F_{j,k} g_{jk}$ représente la quantité de A_j introduite dans les k premiers réacteur de la série (Fig II.2).

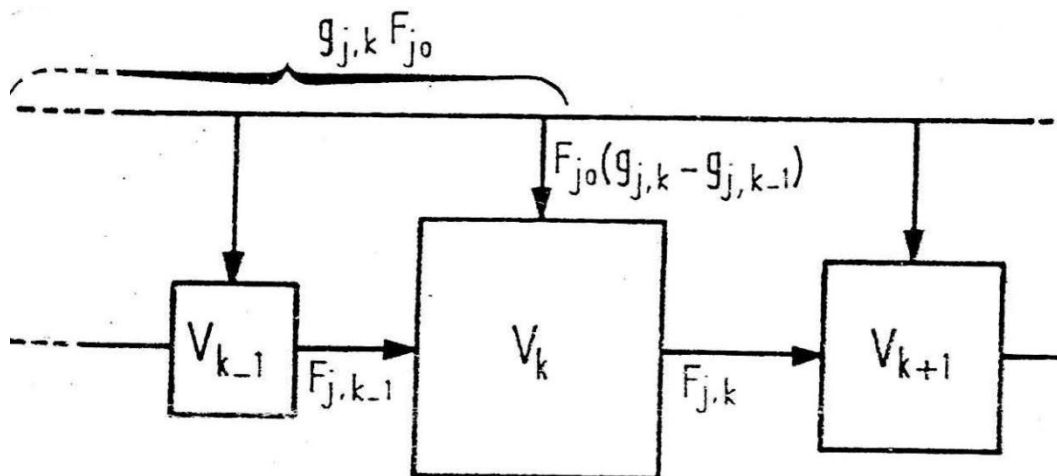


FIG II.2. Série de réacteurs RAC avec alimentation étagée [9].

Le bilan de matière pour un constituant A_j s'écrit comme suit :

$$F_{jk-1} + F_{j0}(g_{jk} - g_{jk-1}) + v_j r_k V_k = F_{jk}$$

En introduisant l'avancement X , on aura

$$F_{jk} = g_{jk} F_{j0} + v_j F_0 X_k$$

On aura alors :

$$F_0(X_k - X_{k-1}) = r_k V_k$$

Ou encore :

$$X_k - X_{k-1} = v_k R_k(X_k)$$

Avec $R_k = \tau r_k / C_0$;

$$v_k = V_k / \sum V_k = V_k / V_R ;$$

$$\tau = \text{temps de passage global dans la série} = V_R / Q_0$$

Les concentrations en fonction de l'avancement X et des fonctions d'étagement g_j sont les mêmes que celles (équations II.7 et II.8) qui ont été établies au paragraphe précédent.

CHAPITRE III

DESCRIPTION DU PROCÉDÉ ÉTUDIÉ

CHAPITRE III : DESCRIPTION DU PROCÉDÉ ÉTUDIÉ

III.1. INTRODUCTION

Dans ce chapitre, on va commencer par décrire le procédé étudié ensuite on présentera son modèle mathématique ainsi que les méthodes numériques de résolution de ce modèle. Enfin, on terminera ce chapitre par la présentation de l'algorithme et de l'organigramme utilisés pour faire la simulation du procédé étudié.

III.2. PRESENTATION DU PROCÉDÉ

Le procédé étudié est formé globalement de trois réacteurs agités continus placés en série. La figure III.1 schématise le procédé étudié [9].

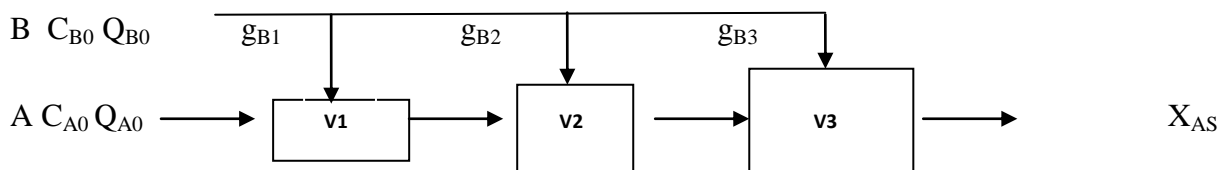


Fig.III.1.Schéma simplifié d'une série de réacteurs agités continus en série avec alimentation étagée en co-réactif B [9].

Les trois réacteurs possèdent en général des volumes différents. Le co-réactif B possède une alimentation étagée, c'est-à-dire qu'il est introduit séparément du réactif A dans les réacteurs et cela pour des raisons essentiellement de sélectivité. L'objectif principal de cette étude est de calculer le taux de conversion à la sortie de la série X_{AS} en fonction des valeurs des fonctions d'étagement g_{B1} , g_{B2} et g_{B3} relatives au débit volumique Q_{B0} du co-réactif B.

III.3. MODELE MATHEMATIQUE DU PROCÉDÉ ET PROCÉDURE DE RESOLUTION DU MODÈLE

Le modèle mathématique du procédé se résume essentiellement aux équations algébriques suivantes [9] :

$$C_{Ak} = C_{A0} \cdot (1 - X_{Ak}) / (q_{A0} + g_{Bk} \cdot q_{B0})$$

$$C_{Bk} = C_{A0} \cdot (M_{gBk} - X_{Ak}) / (q_{A0} + g_{Bk} \cdot q_{B0})$$

$$X_{Ak} = X_{Ak-1} + (k_2 / C_{A0}) \cdot \tau \cdot v_k \cdot C_{Ak} \cdot C_{Bk}$$

avec :

$$q_{A0} = Q_{A0} / (Q_{A0} + Q_{B0})$$

$$q_{B0} = Q_{B0} / (Q_{A0} + Q_{B0})$$

$$\tau = (V_1 + V_2 + V_3) / Q_0$$

$$Q_0 = Q_{A0} + Q_{B0}$$

$$M_{gBk} = g_{Bk} \cdot F_{B0} / F_{A0}$$

$$F_{B0} = Q_{B0} \cdot C_{B0}$$

$$F_{A0} = Q_{A0} \cdot C_{A0}$$

$$v_k = V_k / (V_1 + V_2 + V_3)$$

Pour chaque valeur de k , c'est-à-dire pour chaque réacteur de la série, on détermine C_{Ak} et C_{Bk} en fonction de X_{Ak} et on met leur expression dans la troisième équation pour obtenir finalement une équation algébrique du deuxième degré qu'on devra résoudre par rapport à X_{Ak} . Une fois la valeur de X_{Ak} connue pour chaque réacteur, on utilise alors la première et la deuxième équation pour déterminer C_{Ak} et C_{Bk} . On effectue cette procédure de calcul pour le premier réacteur ($k=1$), le deuxième réacteur ($k=2$) et le troisième réacteur ($k=3$) de la série [9]. Enfin, on a écrit un programme Matlab pour simuler le procédé étudié et visualiser les résultats obtenus [10].

III.4. ALGORITHME UTILISÉ DANS LA SIMULATION

L'algorithme se résume par les étapes suivantes :

Étape I : initialisation des paramètres

$Q_{B0} = 1200$	(débit volumique du réactif B en litre/minute)
$Q_{A0} = 1200$	(débit volumique du réactif A en litre/minute)
$C_{A0} = 0.1$	(concentration de A à l'entrée en mole/litre)
$C_{B0} = 0.1$	(concentration de B à l'entrée en mole/litre)
$k_2 = 200$	(constante cinétique de 2 ^{ème} ordre en litre / (mole.minute)
$g_{B1} = 1/3$	(fonction d'étagement au premier RAC)
$g_{B2} = 1/3$	(fonction d'étagement au deuxième RAC)
$g_{B3} = 1/3$	(fonction d'étagement au troisième RAC)
$V_1 = 1000$	(volume du premier RAC en litres)
$V_2 = 1500$	(volume du deuxième RAC en litres)
$V_3 = 2000$	(volume du troisième RAC en litres)
$X_{A0} = 0$	(taux de conversion à l'entrée de la série de RAC)
$Q_0 = Q_{B0} + Q_{A0}$	
$F_{A0} = C_{A0} * Q_{A0}$	
$F_{B0} = C_{B0} * Q_{B0}$	
$q_{A0} = Q_{A0} / (Q_{A0} + Q_{B0})$	
$q_{B0} = Q_{B0} / (Q_{A0} + Q_{B0})$	
$\tau = (V_1 + V_2 + V_3) / Q_0$	

Étape II :

Faire pour $k=1$ (RAC 1); $k=2$ (RAC 2) et $k=3$ (RAC 3)

$$M_{gBk} = g_{Bk} \cdot F_{B0} / F_{A0}$$

$$F_{B0} = Q_{B0} \cdot C_{B0}$$

$$F_{A0} = Q_{A0} \cdot C_{A0}$$

$$v_k = V_k / (V_1 + V_2 + V_3)$$

$$M_{gB1} = g_{B1} \cdot (C_{B0} / C_{A0})$$

$$M_{gB2} = g_{B2} \cdot (C_{B0} / C_{A0})$$

$$M_{gB3} = g_{B3} \cdot (C_{B0} / C_{A0})$$

$$C_{Ak} = f(X_{A1})$$

$$C_{Bk} = f(X_{A1})$$

$$X_{Ak} = X_{Ak-1} + (k_2 / C_{A0}) \cdot \tau \cdot v_k \cdot C_{Ak} \cdot C_{Bk}$$

Étape III

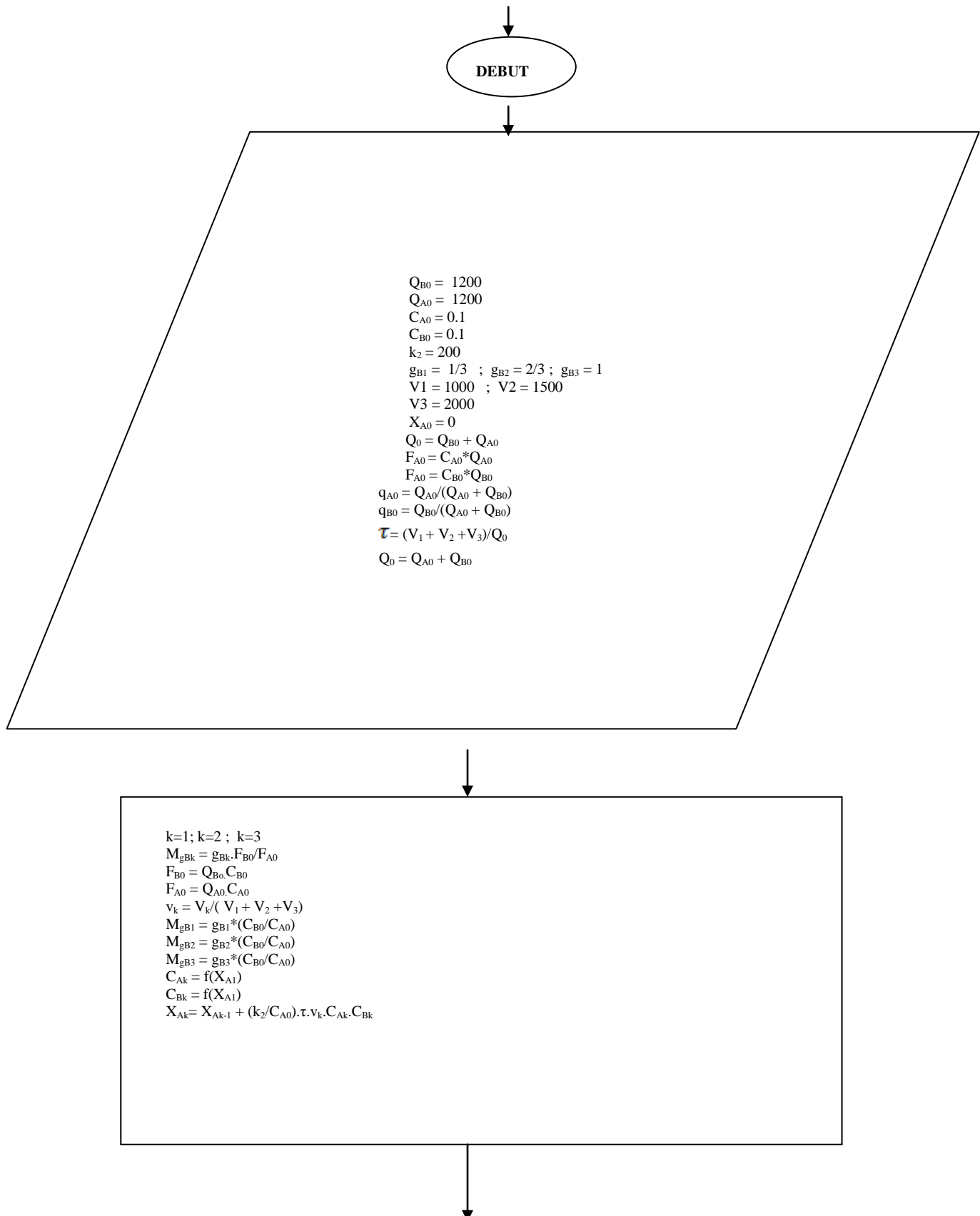
Afficher les résultats trouvés :

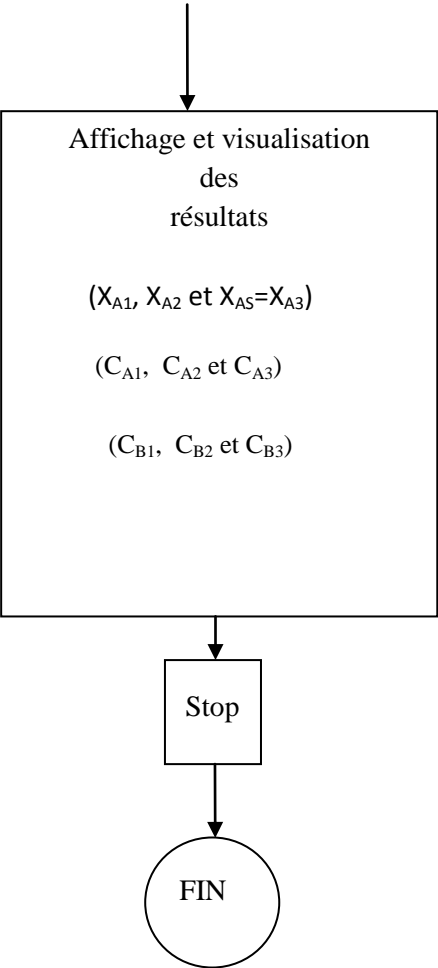
$$(X_{A1}, X_{A2} \text{ et } X_{AS} = X_{A3})$$

$$(C_{A1}, C_{A2} \text{ et } C_{A3})$$

$$(C_{B1}, C_{B2} \text{ et } C_{B3})$$

III.5. ORGANIGRAMME UTILISÉ DANS LA SIMULATION





CHAPITRE IV

RESULTATS ET DISCUSSION

CHAPITRE IV : RESULTATS ET DISCUSSION

IV.1. INTRODUCTION

Dans ce chapitre, on va visualiser géographiquement, par simulation au moyen du logiciel Matlab, comment varie le taux de conversion du réactif clé A (X_{As}) à la sortie du dernier réacteur de la série ainsi que les concentrations des réactifs C_A et C_B en fonction des fonctions d'étagement du co-réactif B (g_{B1} , g_{B2} , g_{B3}), c'est-à-dire essentiellement en fonction de la configuration d'étagement de l'alimentation étagée du co-réactif B.

IV.2. VARIATION DE LA CONCENTRATION C_A LE LONG DE LA SÉRIE DE RÉACTEURS RAC

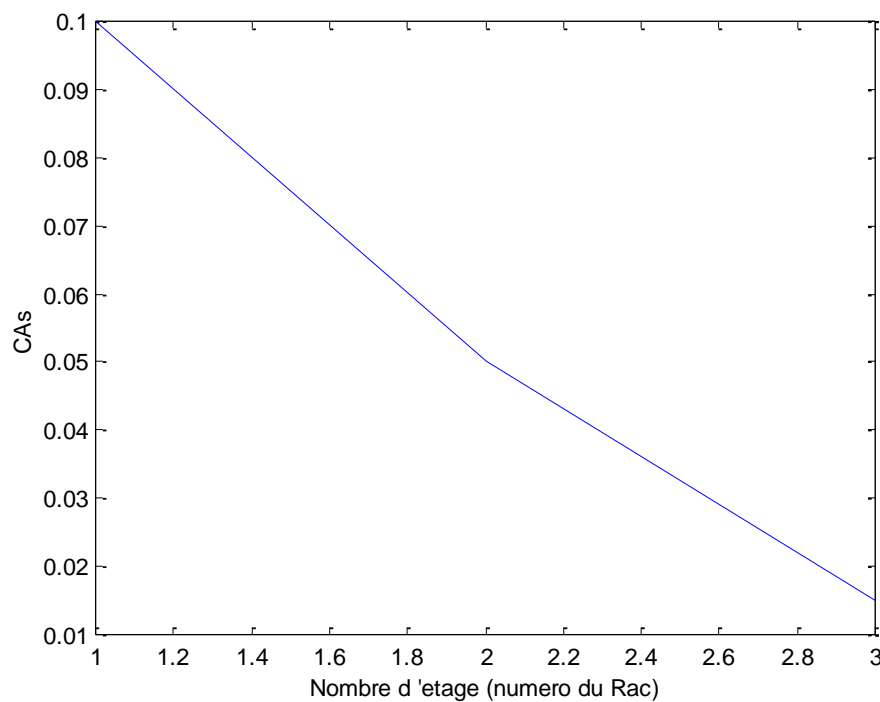


FIG.IV.1: Variation de de la concentration C_A en fonction du nombre de RAC de la série ($g_{B1} = 1/3$; $g_{B2} = 1/3$; $g_{B3} = 1/3$).

La figure IV.1 montre que la concentration du réactif A (C_A) diminue tout le long de la série de réacteurs RAC. Ce résultat s'explique par le fait que le constituant A étant un réactif, sa concentration C_A diminue au fur et à mesure que le mélange réactionnel avance à travers la série ou cascade.

IV.3. VARIATION DE LA CONCENTRATION C_B LE LONG DE LA SÉRIE DE RÉACTEURS RAC

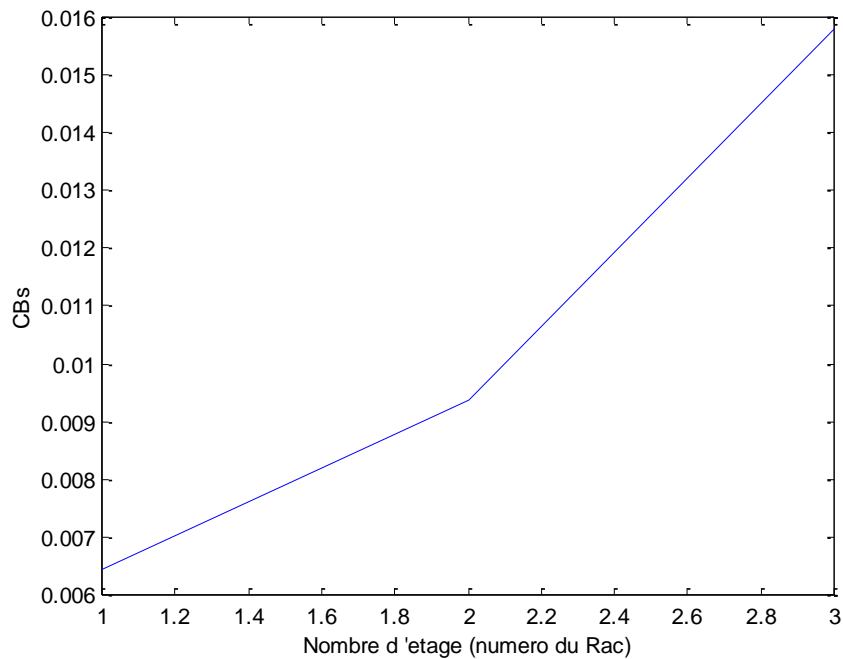


FIG.IV.2 Variation de de la concentration C_B en fonction du nombre de RAC de la série ($g_{B1} = 1/3$; $g_{B2} = 1/3$; $g_{B3} = 1/3$).

La figure IV.2 montre que la concentration du réactif B (C_B) augmente le long de la série de réacteurs RAC. Ce résultat s'explique par le fait que le constituant B étant ajouté d'une manière étagée le long de la série ou cascade, il en résulte que sa concentration C_B augmente malgré sa consommation par réaction chimique. Donc l'ajout de matière en réactif B par alimentation étagée arrive à compenser et est même largement supérieur à la diminution de sa concentration par réaction tout au long de la série de RAC.

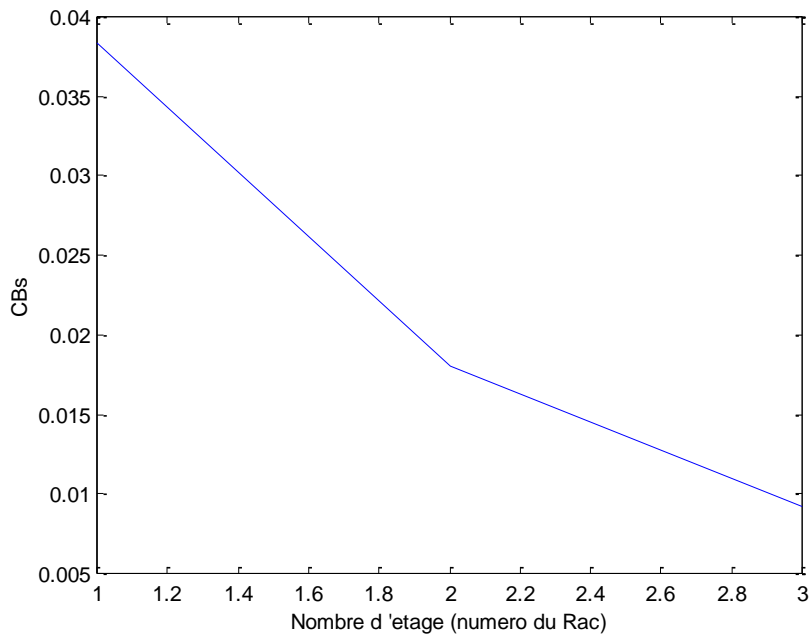


FIG.IV.3. Variation de la concentration C_B en fonction du nombre de RAC de la série dans le cas d'une alimentation normale ou non étagée du co-réactif B ($g_{B1} = 1$; $g_{B2} = 0$; $g_{B3} = 0$).

La figure IV.3 montre que la variation de la concentration du co-réactif B (C_B) le long de la série de réacteurs RAC dans le cas où le réactif B n'aurait pas une alimentation étagée, c'est-à-dire que le réactif B serait mélangé totalement avec le réactif A à l'entrée du premier réacteur (Fig IV.5). On remarque alors que dans ce cas la concentration C_B diminue tout le long de la série de réacteurs.

IV.4. VARIATION DU TAUX DE CONVERSION X_{As} LE LONG DE LA SÉRIE DE RÉACTEURS RAC

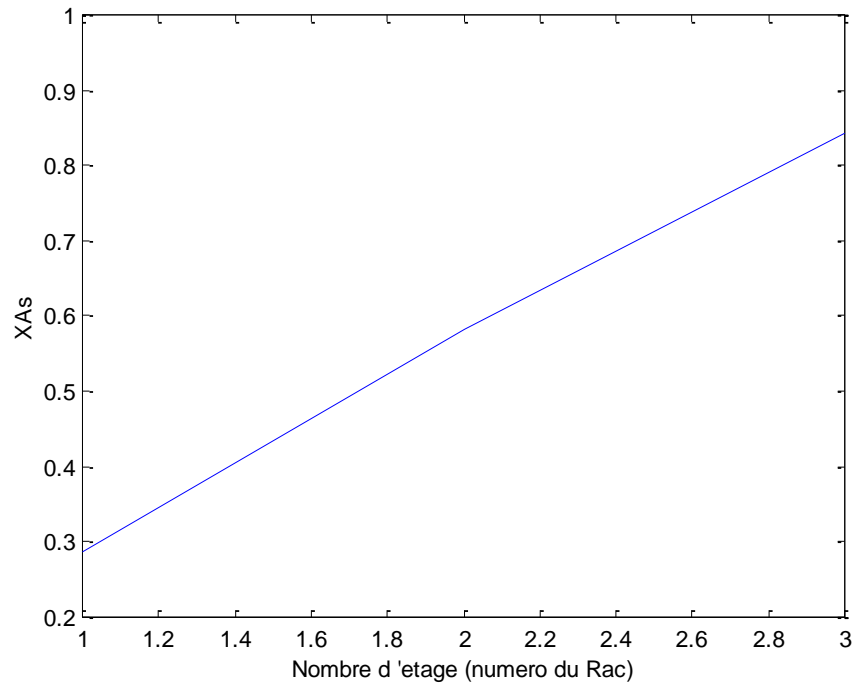


FIG.IV.4. Variation de taux de conversion à la sortie de chaque réacteur en fonction du nombre de RAC de la série ($g_{B1} = 1/3$; $g_{B2} = 1/3$; $g_{B3} = 1/3$).

La figure IV.4 montre que la variation du taux de conversion en réactif clé A (X_{As}) à la sortie de chaque réacteur de la série. On remarque que le taux de conversion augmente progressivement et linéairement tout au long de la série de réacteurs. Cette figure montre que le taux de conversion est égal à 29 % à la sortie du premier réacteur, égal à 58 % à la sortie du deuxième réacteur, et égal 84 % à la sortie du troisième réacteur.

IV.5. INFLUENCE DE L'ÉTAGEMENT DE L'ALIMENTATION DU CO-REACTIF B SUR LE TAUX DE CONVERSION (X_{AS}) A LA SORTIE DE LA CASCADE

Le tableau IV.1 résume l'Influence de l'étagement de l'alimentation du co-réactif B sur le taux de conversion X_{AS} à la sortie du dernier (troisième) réacteur RAC de la cascade.

Tableau IV.1. Influence de l'étagement de l'alimentation du co-réactif B sur le taux de conversion à la sortie du dernier réacteur de la cascade.

→ ↓	Valeur obtenue du taux de conversion X_{AS} à la sortie du dernier RAC (%)
$g_{B1}=1/3$ $g_{B2}=1/3$ $g_{B3}=1/3$	84.2
$g_{B1}=1/2$ $g_{B2}=1/4$ $g_{B3}=1/4$	73.7
$g_{B1}=1/4$ $g_{B2}=1/2$ $g_{B3}=1/4$	73.5
$g_{B1}=1/4$ $g_{B2}=1/4$ $g_{B3}=1/2$	81.5

On remarque que le taux de conversion est maximal quand la répartition de l'alimentation du co-réactif B est uniforme à travers les réacteurs ($g_{B1} = 1/3$; $g_{B2} = 1/3$; $g_{B3} = 1/3$) (fig.IV.5). Le deuxième cas assez optimal est celui dans lequel la majorité de l'alimentation serait envoyée sur le dernier RAC de la série ($g_{B1} = 1/4$; $g_{B2} = 1/4$; $g_{B3} = 1/2$). Les deux autres cas restant donnent à peu près la même valeur de la conversion, avec toutefois un léger avantage pour le cas où la majorité de l'alimentation serait envoyée sur le premier RAC ($g_{B1} = 1/2$; $g_{B2} = 1/4$; $g_{B3} = 1/4$).

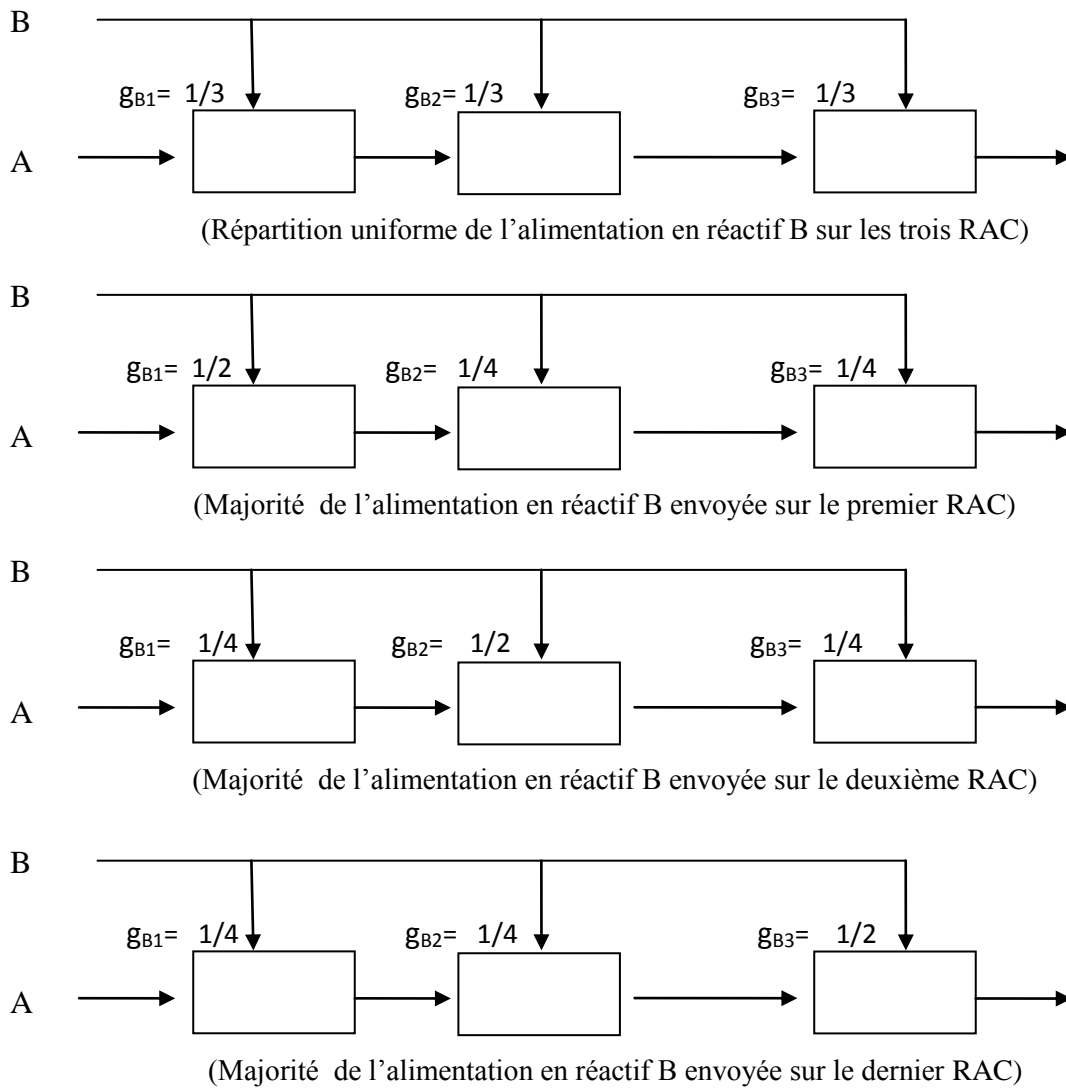


FIG.IV.5. Différentes configuration étudiées de l'alimentation étagée du co-réactif B.

CONCLUSION GÉNÉRALE

CONCLUSION GÉNÉRALE

Dans ce travail on a utilisé un logiciel de simulation (Matlab) pour simuler le fonctionnement d'une cascade de réacteur agité continu (RAC) avec alimentation étagée du co-réactif. Le cas que nous avons simulé correspond à une situation dans laquelle il faut déterminer, par simulation, dans quels cas le taux de conversion du réactif clé (X_{AS}) à la sortie du dernier réacteur serait maximal en fonction de la configuration de l'alimentation étagée et cela en faisant varier les valeurs des fonctions d'étagement du co-réactif (g_{B1} , g_{B2} et g_{B3}).

Les principaux résultats obtenus dans cette étude peuvent être résumés comme suit :

- la concentration C_A diminue au fur et à mesure que le mélange réactionnel avance à travers la série de réacteurs ;
- la concentration du réactif B (C_B) augmente le long de la série de réacteurs RAC. Ce résultat s'explique car le co-réactif B ajouté d'une manière étagée le long de la série, sa concentration C_B augmente malgré sa consommation par réaction chimique;
- le taux de conversion (X_A) augmente progressivement et linéairement tout au long de la série de réacteurs ;
- le cas le plus optimal pour lequel le taux de conversion est maximal ($X_{AS} = 84.2 \%$) correspond au cas dans lequel la répartition de l'alimentation du co-réactif B est uniforme à travers tous les réacteurs ($g_{B1} = 1/3$; $g_{B2} = 1/3$; $g_{B3} = 1/3$) ;
- un deuxième cas assez optimal ($X_{AS} = 81.5 \%$) est celui dans lequel la majorité de l'alimentation serait envoyée sur le dernier RAC de la série ($g_{B1} = 1/4$; $g_{B2} = 1/4$; $g_{B3} = 1/2$).

REFERENCES
BIBLIOGRAPHIQUES

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] PIEERE TRAMBOUZE, Les Réacteurs Chimiques (conception / calcul / mise en œuvre), IFP, (1984), p 36.
- [2] E.KOLLER, Aide-Mémoire Génie Chimique, Paris, Dunod, 3^{ème} édition, (2009), p 546.
- [3]D.RONZE, Introduction au génie des procédés. Edition TEC & DOC, Paris (2008) p286.
- [4]L.JIMMY, H.UMPHREY, E.GEORGE, KELERII, Procédés de séparation techniques, sélection dimensionnement. Dunod, Paris, (2001).
- [5]P.BACHMAN, P.TISOT, Précise de génie chimique. Librairie de l'université George et Cie. S.A. Genève, (1981).
- [6]M. GUIUNET, S. LAFORGE, D. COUTON, Réactions et réacteurs chimiques, Ellipse, (2007).
- [7]J.LIETO, Le génie chimique a l'usage des chimistes. Laboratoire d'automatique et de génie des procédés (LAGEP), université Claude Bernard Lyon-ESCPEL yon-CNRS, TEC-DOC Lavoisier, Paris, (1998).
- [8]P.WUITHIER, Le pétrole, raffinage et génie chimique. Publications de l'institut Français du pétrole. 2^{ème} Editions, TOME 1, Paris, (1972) p 545.
- [9]J. VILLERMAUX, Génie de la réaction chimique conception et fonctionnement des réacteurs, Paris, 2^{me} édition, (1993), p 129.
- [10]WILLIAM.LUYBEN, Process modeling simulation and control for chemical engineers, second Edition, Mc Graw-hill Edition, Singapore, (1996).

Résumé

Dans ce mémoire on a étudié par simulation l'influence de la répartition de l'alimentation étagée d'un co-réactif sur le fonctionnement d'une série de trois réacteurs RAC. Les résultats trouvés ont montré comment devrait être distribuée l'alimentation étagée du co-réactif pour avoir un taux de conversion maximal à la sortie de la série.

Mots clé: réacteur, RAC, conversion, alimentation étagée, simulation.

Abstract

In this thesis we studied by simulation the influence of a co-reactant staged feed distribution on the functioning of a three CSTR reactor serial. The obtained results showed how would be distributed the co-reactant staged feed to obtain a maximal conversion at the serial exit.

Key words: reactor, CSTR, conversion, staged feed, simulation.

ملخص

في هذه الأطروحة درسنا بواسطة المحاكاة تأثير إنتشارتموين ذو طوابق لمتفاعل مشارك على تشغيل سلسلة متكونة من ثلاثة مفاعلات متجانسة مستمرة. النتائج المتحصل عليها تشير كيف يجب أن يكون انتشارالتموين ذو طوابق للمتفاعل المشارك للحصول على أقصى درجة التحول عند مخرج السلسلة.
الكلمات المفتاحية: مفاعل، مفاعل متجانس مستمر، درجة التحول، تموين ذو طوابق, محاكاة.
