

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

THEME

Calcul d'un Réacteur piston avec alimentation
étagée

Présentée par :

ELBAR Fatima Zohra

Devant le jury composé de :

Président : Dr. NEDJAR Zohir

Univ. Biskra

Examineur : M^{me} BOUTAMINE Zineb

Univ. Biskra

Encadreur : Dr. BENDJAOUAHDOU Chaouki

Univ. Biskra

Promotion 2016

Remerciements

*Avant tout, nous doit remercier dieu de tout la puissant qui nous
donnons la force pour achever cette travail.*

*La grande merci à notre encadreur Monsieur BENDJAOUAHDOU
CHAOUKI, pour son suivi sérieux, ses encouragements et ces conseils
fructueux,*

*Nous remercions vivement Monsieur le président de jury NEDJAR
Zohir, et l'examineur M^{me} BOUTAMINE Zineb qui ont accepté de
juger notre travail.*

Merci à tous les enseignants du département de chimie industrielle.

*Enfin, nous espérons que ce travail soit la bonne expression de nous
gratitude.*

*D*édicace

A ma très chère mère

A mon père

A mes frères et sœurs

A mes amis...

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	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 critère de choix d'un réacteur.....	10

CHAPITRE II : ÉTUDE DE RÉACTEUR PISTON

II.1. Introduction	11
II.2. Réacteur piston sans recyclage.....	13
II.2.1. Réaction simple en régime permanent	13
II.2.2.Réaction composites régime permanent	15
II.2.3. Réacteur piston en régime transitoire.....	16

II.3. Reacteur piston avec recyclage	16
II.3.1. Equation de fonctionnement.....	16
II.3.2. Applications aux réactions auto catalytiques.....	19
II.3. Réacteur piston a alimentation étagée	22

CHAPITRE III : DESCRIPTION DU PROCEDE ETUDIE

III.1. Introduction	26
III.2. Description du procédé	26
III.3. Modèle mathématique	26
III.4. Méthodes numériques de résolution numérique du modèle dynamique du procédé	27
III.6. L'organigramme utilisé dans la simulation	32

CHAPITRE IV : RESULTATS ET DISCUSSION

IV.1. INTRODUCTION	33
IV.2. Interprétation des résultat	33
CONCLUSION GENERALE	37
RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES	38

Liste des figures

Figure	Titre	Page
Figure I.1	Réacteur cuve.....	4
Figure I.2	Réacteur tube.....	4
Figure I.3	Opération continue.....	5
Figure I.4	Opération discontinue.....	5
Figure I.5	Opération semi-continue.....	6
Figure I.6	Facteurs gouvernant le fonctionnement d'un réacteur chimique.....	11
Figure II.1	exemple de dispositif ou l'on peut approcher l'écoulement piston....	12
Figure II.2	bilan de matière dans un écoulement piston.....	12
Figure II.3	Réacteur piston à recyclage.....	17
Figure II.4	Réacteur piston à recyclage.....	18
Figure II.5	Réacteur à recyclage de temkin.....	18
Figure II.6	Fraction résiduelle à la sortie d'un réacteur piston à recyclage réaction isotherme d'ordre n=1 et n=2.....	20
Figure II.7	Fraction résiduelle à la sortie d'un réacteur piston à recyclage réaction isotherme d'ordre n=1 et n=2.Echelle linéaire pour f _A	20
Figure II.8	Réaction auto-catalytique.....	21
Figure II.9	Optimisation d'une réaction auto-catalytique.....	21
Figure II.10	Optimisation d'une réaction auto-catalytique à l'aide d'un réacteur piston à recyclage.....	22
Figure II.11	Réacteur a alimentation et étagée.....	23
Figure II.12	Exemple d'alimentation étagée d'un réacteur piston.....	25
Figure III.1	Montre un réacteur à écoulement piston avec alimentation étagée du Co-réactif B.....	26
Figure IV.1	Variation de X _A en fonction du volum V _R pour différentes valeurs de C _{A0}	32
Figure IV.2	Variation de X _A en fonction du volum V _R pour différentes valeurs de C _{B0}	32
Figure IV.3	Variation de X _A en fonction du volum V _R pour différentes valeurs du débit Q ₀	33
Figure IV.4	différents répartitions étudiées de l'alimentation étagée du Co-	

réactif B.....	35
----------------	----

Liste des tableaux

Tableau	Titre	Page
Tableau IV.1	Influence de l'étagement de l'alimentation du co-réactif B sur le taux de conversion à la sortie du réacteur.	34

NOMENCLATURES

Symbole	Définition	l'unité
CO ₂	dioxyde de carbone	/
z	valeur minimale de l'abscisse adimensionnelle à l'entrée	m
V _R	volume du réacteur	L
F_j	débit volumique de constituant j	m ³ .s ⁻¹
C_j	La concentration molaire de constituant j	mol.m ⁻³
t	Temps	s
n _j	Nombre de mole de constituant j	
R _j	Taux de recyclage de constituant j	mol
r		
X _E	vitesse de réaction	mol m ⁻³ s ⁻¹
X _S		
τ	Taux de conversion à la sortie	
t _s	Taux de conversion à l'entrée	
	temps de passage	s
V _{RS}		s
F	temps de séjour	
T		L
	volume totale de réacteur	
Da		K
E		/

I	Température moyenne	J/mol^{-1}
	nombre de Damköhler	
	Energie d'activation	
Q_{B0}		
Q_{A0}	Rapport d'inertes	L/min
	débit volumique du réactif B	
C_{A0}	débit volumique du réactif	L/min
C_{B0}	concentration de A à l'entrée	mol/L
K	concentration de B à l'entrée	mol/L
Z_{\min}	constante cinétique de 2 ^{ème} ordre	
	valeur minimale de l'abscisse adimensionnelle à l'entrée	L/mol.min
		/

Résumé

L'objectif de ce travail a été de calculer le taux de conversion à la sortie d'un réacteur piston avec alimentation étagée et d'étudier l'influence des paramètres opératoires sur la valeur de la conversion. Les résultats obtenus par simulation montrent que le taux de conversion à la sortie du réacteur est influencé par le volume du réacteur (V_R), les concentrations des réactifs (C_{A0} , C_{B0}) et par le débit volumique d'alimentation (Q_0). Il a été aussi trouvé que le taux de conversion dépend aussi de la répartition de fonction d'étagement du co-réactif.

Mots clés : réacteur piston, taux de conversion, alimentation étagée, réactifs, fonction d'étagement

Abstract

The objective of this work was to calculate the conversion rate at the exit of a staged feed plug flow reactor and to study the impact of operational parameters on the conversion rate. The results obtained by simulation show that the conversion rate at the reactor exit is influenced by the reactor volume (V_R), reactant concentrations (C_{A0} , C_{B0}) and by the feed flowrate (Q_0). It was also found that the conversion rate is influenced by the distribution of the staging function of the co-reactant.

Key words: plug flow reactor, conversion rate, staged feed, reactants, staging function.

ملخص

هدف هذا العمل كان حساب درجة التحول عند خروج مفاعل ذو سياران مكبسي و مزود بتموين ذو طوابق ، ودراسة تأثير الاعدادات العملية علي درجة التحول. النتائج المتحصل عليها بالمحاكاة تبين بان درجة التحول عند خروج المفاعل تتأثر بحجم المفاعل (V_R) ، تركيز المتفاعلات (C_{A0} , C_{B0}) وبالتدفق الحجمي (Q_0). ووجدنا ايضا ان درجة التحول يتأثر بانتشار دالة تدريج الطوابق للمفاعل المشارك.

الكلمات المفتاحية : مفاعل مكبس، درجة التحول ، تغذية الطوابق ، دالة الطوابق



*Introduction
générale*

Introduction générale

L'une des branches importantes du génie des procédés est le génie de la réaction chimique qui s'intéresse aux méthodes de mise en œuvre rationnelle des transformations chimiques et en particulier aux appareils dans lesquels sont conduites les réactions: les réacteurs 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.

Dans ce mémoire nous allons étudier par simulation le réacteur piston avec alimentation étagée. L'alimentation étagée est utilisée dans le cas où on a une réaction fortement exothermique et pour laquelle un Co-réactif est ajouté d'une manière étagée et cela pour pouvoir contrôler la température et éviter un dégagement important de la chaleur qui pourrait être nuisible aux produits de la réaction et au réacteur lui-même. L'alimentation étagée est aussi utilisée pour favoriser la sélectivité d'un produit désiré par rapport à un produit secondaire.

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 du réacteur piston, 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 :

*Généralité Sur Les
Réacteurs*



CHAPITRE I : GENERALITES SUR LES REACTEURS

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 REACTEURS 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].

I.3. CLASSIFICATION DES REACTEURS 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.2.1. 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.2.1.1. Réacteur cuve

Le réacteur est un récipient où les trois dimensions sont comparables. 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].

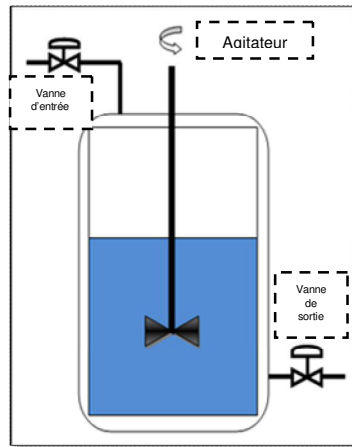


FIG.I.1. Réacteur cuve

I.2.1.2. Réacteur tube

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

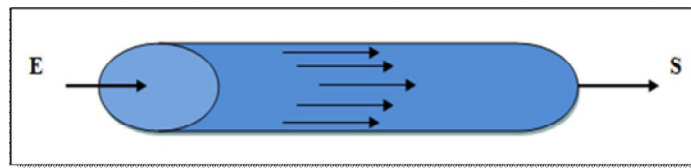


FIG.I.2. Réacteur tube

I.2.2. 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.2.2.1. 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. Le système continu est généralement conçu pour travailler en régime stationnaire. [1]

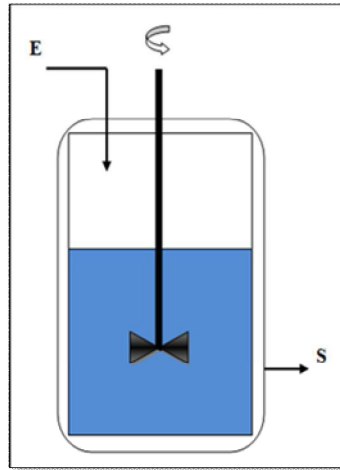


FIG.I.3. Opération continue

I.2.2.2. 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; ce type d'appareil a la faveur des industriels pour les opérations jugées très délicates et les petites productions [1].

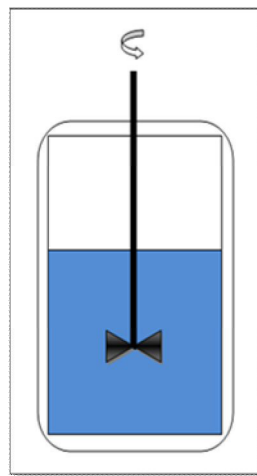


FIG.I.4. Opération discontinue

I.2.2.3. 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. Le réacteur en semi-continu ne diffère de la marche en discontinu que par les appareils annexes [1].

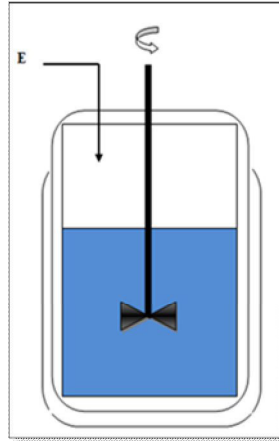


FIG.I.5. Opération semi-continue

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 impensable industriellement.

I.2.3. 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.

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.

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.

I.2.3.1. 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 [2,3].

I.2.3.2. 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) [2,3].

I.2.3.3. 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.
- 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.

- 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 [2,3].

I.2.3.4. 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 [2,3].

I.2.3.5. 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 [2,3].

I.2.3.6. 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) [2,3].

I.2.3.7. 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 [2,3].

I.2.3.8 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 [2]).

Remarque :

Dans les milieux hétérogènes, comme il est possible de s'en rendre compte, 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 (récipient) 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.

-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 [2].

I.3. FACTEURS GOUVERNANT LE FONCTIONNEMENT D'UN REACTEUR CHIMIQUE

La figure(I.1) 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.

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.

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 (figure I.6). Tel est précisément l'objet du génie de réaction chimique [4].

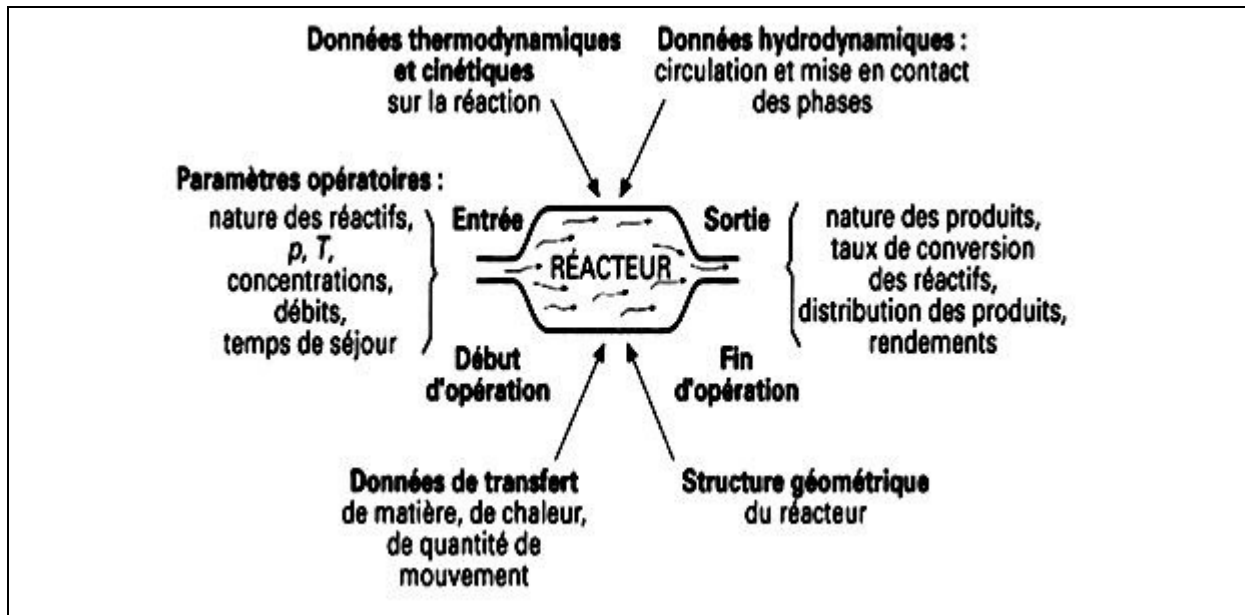


FIG. I.6. Facteurs gouvernant le fonctionnement d'un réacteur chimique [4].

I.4. LES CRITERES DE CHOIX D'UN REACTEUR

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

- 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, sa destruction, etc...).
- 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.

Mais il faut tenir compte de bien d'autres facteurs, notamment :

- de 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, entre des solides fondus etc.. [1].

CHAPITRE II :

*Etude du réacteur
piston*

CHAPITRE II : ETUDE DE REACTEUR PISTON

II.1.INTRODUCTION

Dans ce chapitre on va présenter le réacteur piston sans recyclage, le réacteur piston avec recyclage et le réacteur piston avec alimentation étagée.

II.2.REACTEUR PISTON SANS RECYCLAGE

Le mélange réactionnel est en écoulement piston lorsqu'il progresse dans le réacteur par tranches parallèles et indépendantes n'échangeant pas de matière (diffusion axiale négligeable), à la manière d'un piston dans un cylindre. Les variables d'état sont constantes dans toute section normale à l'écoulement, elles ne dépendent que d'un seul paramètre d'espace, mesuré parallèlement au sens de l'écoulement. Une condition nécessaire et suffisante de l'écoulement piston est que toutes les particules entrées ensemble aient le même temps de séjour dans le réacteur [5].

En pratique, l'hypothèse de l'écoulement piston s'applique souvent à des réacteurs tubulaires ou l'écoulement est très turbulent, ou à des réacteurs contenant un garnissage qui rend les profils de vitesse et de température sensiblement plats, tout au moins lorsque la réaction n'est pas très exothermique. En présence d'une forte thermicité, la température sur l'axe peut être très différente de la température à la paroi. L'utilisation du modèle d'écoulement piston à un seul paramètre d'espace est encore possible à condition de raisonner sur des grandeurs moyennes dans la section droite. En présence de gradients de température, la forte non-linéarité de l'équation d'Arrhenius limite la portée de cette simplification et oblige à recourir à un modèle à deux dimensions. L'hypothèse de l'écoulement piston peut également s'appliquer à des formes de réacteurs apparemment différents du tube : l'écoulement piston peut également s'appliquer à des lits de catalyseur d'un réacteur à lits fixes, ou à l'écoulement radial dans un lit annulaire de catalyseur à partir d'une source placée sur l'axe [5].

Nous choisirons comme variable d'espace le long de l'écoulement le volume V_R déjà balayé par la tranche de mélange réactionnel depuis son entrée dans le réacteur, ce qui permet de traiter le cas d'une section droite Ω_R variable. Si celle-ci est constant, on peut utiliser l'abscisse axiale z telle que $v_R = \Omega_R z$.

Ecrivons le bilan de matière du constituant A_j par rapport à un élément de volume dV_R fixe par rapport au réacteur (FIG.II.1)

En régime quelconque, l'état du mélange réactionnel est fonction de deux variables : la position le long de l'écoulement, repérée par V_R et le temps t .

Le bilan instantané en flux s'écrit (FIG II.2) :

$$F_j dV_R = F_j + \left(\frac{\partial F_j}{\partial V_R} \right) dV_R + \left(\frac{\partial C_j}{\partial t} \right) dV_R \quad (\text{II. 1})$$

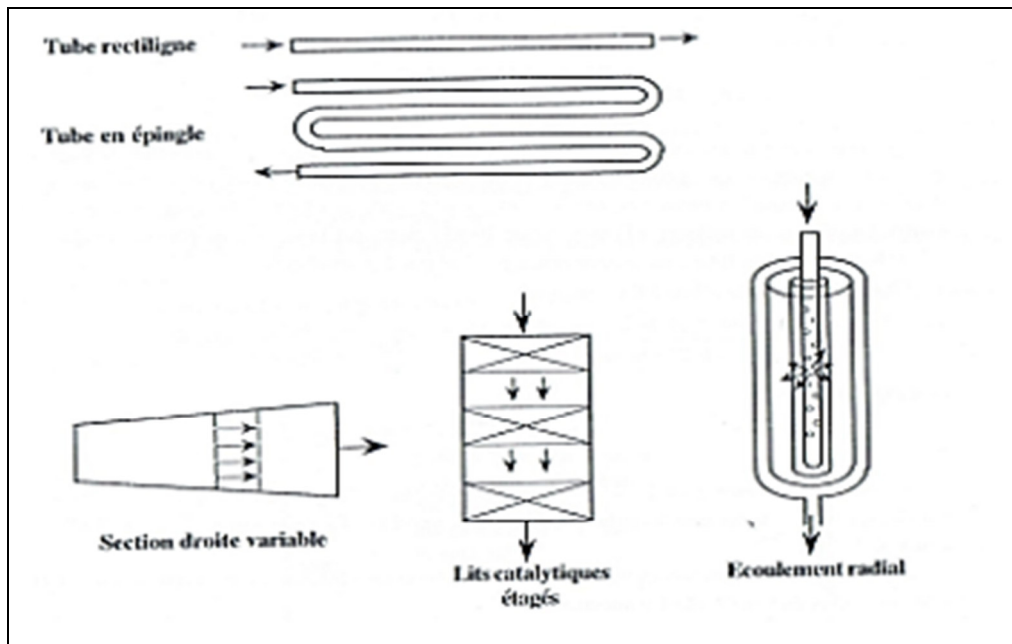


FIG.II.1.exemple de dispositif ou l'on peut approcher l'écoulement piston [5].

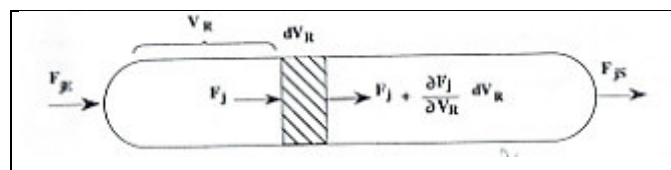


FIG.II.2. bilan de matière dans un écoulement piston [5].

Ceci est une nouvelle forme de l'équation générale :

$$\left(\text{flux de } A_j \text{ entrant} \right) + \left(\text{débit de production de } A_j \right) = \left(\text{flux de } A_j \text{ sortant} \right) + \left(\text{débit d'accumulation de } A_j \right)$$

Le terme d'accumulation s'obtient en écrivant que l'élément de volume dV_R contient $dn_j = C_j dV_R$ moles d' A_j , de sorte que :

$$\left(\frac{\partial n_j}{\partial t}\right) = \left(\frac{\partial C_j}{\partial t}\right) dV_R \quad (\text{II. 2})$$

S'écrit encore :

$$\frac{\partial F_j}{\partial V_R} + \frac{\partial C_j}{\partial t} = R_j \quad (\text{II. 3})$$

Ou

$$\frac{\partial Q C_j}{\partial V_R} + \frac{\partial C_j}{\partial t} = R_j \quad (\text{II. 4})$$

Ou Q est le débit volumique local. Si la section droite Ω_R est constante et si l'on introduit la vitesse linéaire u du mélange telle que $Q = u\Omega_R$. On obtient une forme plus classique :

$$\frac{\partial}{\partial z}(u C_j) + \frac{\partial C_j}{\partial t} = R_j \quad (\text{II. 5})$$

II.2.1 Réaction simple en régime permanent

En régime permanent d'écoulement, l'état du mélange n'est plus fonction que de la seule variable d'espace V_R (ou z) :

$$\frac{\partial F_j}{\partial V_R} = V_j r \quad (\text{II. 6})$$

Introduisons l'avancement X de la réaction tel que

$$F_j = F_{j0} + V_j F_0 X \quad (\text{II. 7})$$

Devient :

$$\frac{\partial X}{\partial V_R} = \frac{r}{F_0} = \frac{r}{Q_0 C_0} \quad (\text{II. 8})$$

Si r n'est fonction que de X , par exemple à pression et température constantes, le volume V_R nécessaire pour faire passer l'avancement X_E à X_S s'obtient par intégration :

$$V_R = F_0 \int_{X_S}^{X_E} \frac{dX}{r} \quad (\text{II. 9})$$

Ce qui correspond au temps de passage :

$$\tau = C_o \int_{X_E}^{X_S} \frac{dX}{r} \quad (\text{II. 10})$$

Là encore, d'autres formes de (II.5) à (II.9) sont possibles. Si l'on se réfère à un réactif-clé A (taux de conversion X_A), on trouve successivement :

$$\frac{dX}{dV_R} = \frac{r}{F_{AO}} = \frac{r}{Q_o C_{AO}} \quad (\text{II. 11})$$

$$V_R = F_{AO} \int_{X_{AE}}^{X_{AS}} \frac{dX_A}{r} \quad (\text{II. 12})$$

$$\tau = C_{AO} \int_{X_{AE}}^{X_{AS}} \frac{dX_A}{r} \quad (\text{II. 13})$$

Si l'on rapporte la vitesse r_w à la masse de catalyseur W présente dans le réacteur, (II.5) devient :

$$\frac{dF_j}{dW} = v_j r_w \quad (\text{II. 14})$$

Introduisons l'avancement de la réaction X_M tel que $F_j = F_0 + v_j Q_m X_m$ et le temps $\tau' = W/Q_m$:

(II.9) prend la forme :

$$\tau' = \int_{X_{mE}}^{X_{mS}} \frac{dX_m}{r_w} \quad (\text{II. 15})$$

Dans le cas particulier d'une réaction se déroulant sans dilatation (exemple en phase liquide), le débit volumique Q_o est constant tout le long du réacteur. Posons $d\tau = dV_R / Q_o$ et introduisons la concentration $C_j = F_j / Q_o$ l'équation (II.5) s'écrit simplement :

$$\frac{dC_j}{d\tau} = v_j r \quad (\text{II. 16})$$

Cette équation est à rapprocher de celle d'un réacteur fermé : le temps de passage τ joue ici le rôle du temps de séjour t_s . Cette remarque est à la base de la transposition en continu d'une opération en réacteur fermé. Il suffit en principe d'égaliser le temps de passage τ (définir sur les conditions d'entrée) au temps t_s nécessaire pour obtenir le résultat recherché dans le réacteur fermé. Ceci n'est plus vrai lorsque le mélange subit une expansion ou une contraction pour des raisons physiques ou chimiques pendant la réaction [5].

Le temps de séjour t_s dans le réacteur piston est alors tel que :

$$dt_s = \frac{dV_R}{Q} = \frac{dV_R}{\beta Q_0(1 + \alpha X)} \quad (\text{II. 17})$$

De sorte que, compte tenu de (II.7) :

$$t_s = C \int_{X_{mE}}^{X_{mS}} \frac{dX}{\beta(1 + \alpha X)r} \quad (\text{II. 18})$$

Nous voyons que $t_s \neq \tau$ (voir Eq.II.9) sauf si $\beta = 1$ et $\alpha = 0$. Plaçons-nous dans le cas où $\beta = 1$. $t_s < \tau$ si $\alpha > 0$ et $t_s > \tau$ si $\alpha < 1$. Ceci s'explique aisément par l'expansion du mélange, dans le premier cas, et par sa contraction dans le second.

Nous remarquons de plus que (II.17) est formellement identique à l'expression ($t_s = C_0 \int_{X_S}^{X_E} \frac{dX}{\beta(1 + \alpha X)r}$) obtenue dans le cas d'un réacteur fermé. Ceci montre l'identité profonde de fonctionnement entre le réacteur fermé et le réacteur piston, à condition de raisonner en coordonnées lagrangiennes liées à la progression du mélange réactionnel pour le second. Toutefois, seule la notion de temps de passage a véritablement de l'intérêt dans les calculs de conception et de dimensionnement du réacteur, puisqu'elle relie l'avancement le volume réactionnel et le débit d'alimentation [5].

II.2.2 réaction composites en régime permanent

D'après (II.2), le bilan des A_j en régime permanent s'écrit :

$$\frac{dF_j}{dV_R} = \sum_i r_i \nu_{ij} \quad (j = 1, 2 \dots S) \quad (\text{II. 19})$$

Avec les avancements X_i des réactions simultanées :

$$F_j = F_{j0} + F_0 \sum_i v_{ij}$$

D'où on déduit, en raison de l'indépendance des R réactions :

$$\frac{dX_i}{dV_R} = \frac{r_i}{F_0} = \frac{r_i}{Q_0 C_0} \quad (i = 1, 2 \dots R) \quad (II.20)$$

Ou encore

$$\tau = C_0 \int_{X_E}^{X_S} \frac{dX_i}{r_i} \quad (i = 1, 2 \dots R) \quad (II.21)$$

II.3.3 réacteur piston en régime transitoire

Les équations de bilan ont été écrites au début du paragraphe. Par exemple, pour une réaction simple :

$$\frac{dF_j}{dV_R} + \frac{dC_j}{dt} = V_j r \quad (II.22)$$

Les concentrations sont liées au flux par $F_j = QC_j$. En phase condensée (par exemple liquide), Q est lié flux total par l'équation d'état dans un gaz parfait, $pQ = nFT$,

Avec $F = \sum_i F_j + F_I$

Le système doit donc être complété par les relations :

$$C_j = \frac{F_j}{\sum F_j + F_I} \frac{P}{RT} \quad (II.23)$$

L'ensemble des équations (II.20) et (II.21) permet en principe le calcul des flux F_j (y compris les inertes F_I pour lesquels on simplement $v_i = 0$) à condition qu'on connaisse p et T en fonction de V_R et de t ou que d'autres réactions de bilan (énergie, quantité de mouvement) donnent accès au calcul de ces variables physiques [5].

II.3.REACTEUR PISTON AVEC RECYCLAGE

II.3.1.Equation de fonctionnement

Dans certaines applications, il est intéressant de renvoyer une partie du débit sortant d'un réacteur piston à l'entrée de celui-ci (FIG.II.3). Le taux de recyclage R est le rapport du débit quittant le système. Par définition et pour tout constituant $R = F_{j3} / F_{j5}$. Prenons la référence à l'entrée. Les bilans à l'entrée et à la boucle s'écrivent (voir FIG.II.3) :

$$F_{j2} = F_{jS} + F_{j3} = F_{jS} (1 + R)$$

et

$$F_{j1} = F_{j3} + F_{j0} = \frac{R}{1 + R} F_{j2} + F_{j0} \tag{II. 24}$$

Définissons les avancements X_1 à l'entrée du réacteur piston et X_S à la sortie. Le flux de matière dans le réacteur est $1+R$ fois plus grand qu'à l'extérieur de la boucle, de sorte que les flux de référence doivent être multipliés par $1+R$:

$$F_{j1} = (1 + R) (F_{j0} + v_j F_0 X_1)$$

$$F_{j1} = (1 + R) (F_{j0} + v_j F_0 X_S)$$

D'où $(1 + R) (F_{j0} + v_j F_0 X_1) = (1 + R) (F_{j0} + v_j F_0 X_S)$

On en déduit :

$$X_1 = \frac{R}{1 + R} X_S \tag{II. 25}$$

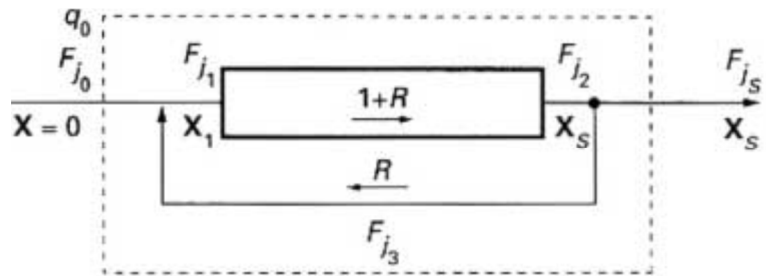


FIG.II.3. Réacteur piston à recyclage [5].

Le débit de référence dans le réacteur piston étant $Q_0 (1+R)$, le bilan de matière s'écrit (r fonction de X seulement) :

$$\frac{V_R}{Q_0(1 + R)} = C_0 \int_{X_1}^{X_S} \frac{dX}{r} \tag{II. 26}$$

D'où l'équation caractéristique du réacteur piston à recyclage considéré comme un tout (boucle comprise) :

$$\tau = \frac{V_R}{Q_0} = C_0 (1 + R) \int_{\frac{R}{R+1} X_S}^{X_S} \frac{dX}{r} \tag{II. 27}$$

La signification de τ apparait dans un diagramme où l'on porte C_0/r en fonction de X (FIG.II.4).

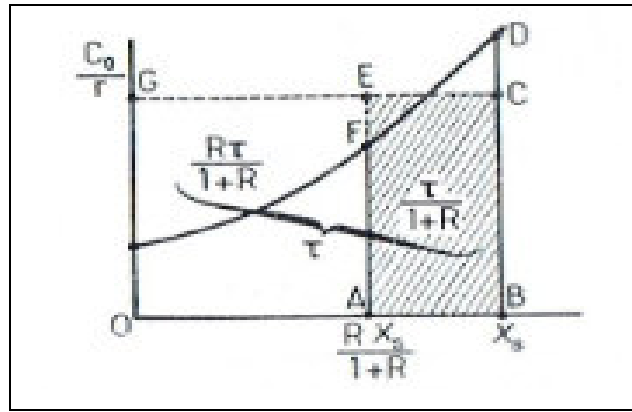


FIG.II.4. Réacteur piston à recyclage [5].

Si $X_s = OB$ et $\frac{RX_s}{1+R} = OA$, la quantité est $\frac{\tau}{1+R}$ la surface ABDF.

Traçons EC tel que cette surface soit égale à ABCE. on voit que le temps de passage n'est autre que la surface du rectangle OBCG.

- Lorsque R est petit, le comportement est proche de celui d'un réacteur piston simple.
- Lorsque R est grand, le théorème de la moyenne permet d'écrire (II.26) sous la forme :

$$\tau = C_0(1 + R) \left(X_s - \frac{R}{R + 1} X_s \right) \frac{1}{r(X)}$$

Avec

$$\frac{RX_s}{1 + X_s} < X < X_s$$

- Lorsque $R \rightarrow \infty$, $X \rightarrow X_s$ et l'équation (II.26) devient :

$$\tau = \frac{C_0 X_s}{r_s}$$

qui n'est autre que l'équation caractéristique d'un réacteur agité continu. Ceci se conçoit bien, car le fort taux de recyclage rend la composition quasiment uniforme dans tout le réacteur. Un dispositif du à temkin (FIG.II.5) met à profit cette propriété pour mesurer des vitesses de réactions catalytiques.

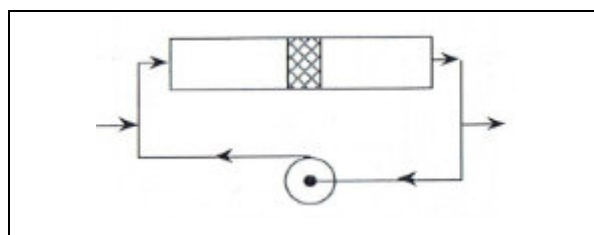


FIG.II.5. Réacteur à recyclage de temkin [5].

Le comportement du réacteur de tamkin est analogue à celui d'un réacteur parfaitement agité continu, qui se prête remarquablement à des études cinétiques en raison de la simplicité de l'exploitations des mesures.

Exemple : réaction du 1^{er} ordre sans dilatation, $A \rightarrow$ produits. On obtient facilement à partir de (II.27) avec ici $X=X_A$:

$$X_A = \frac{1 - \exp\left(\frac{K\tau}{1+R}\right)}{\frac{R}{1+R} - \exp\left(\frac{K\tau}{1+R}\right)} \quad (\text{II. 28})$$

dont les deux limites sont bien :

$$\left\{ \begin{array}{l} R \rightarrow 0 \quad X_A = 1 - \exp(-k\tau) \\ R \rightarrow \infty \quad X_A = \frac{K\tau}{1 + k\tau} \end{array} \right. \quad (\text{II. 29})$$

Les figures FIG.II.6 et FIG.II.7 représentent les fractions résiduelles $f_A = 1-X_A$ en fonction des nombres de DamKöhler $Da = k_1\tau$ et $Da = k_2 C_{A0}\tau$ pour les réactions $A \rightarrow$ produit du premier et du second ordre isothermes dans un milieu sans dilatation dans un réacteur piston à recyclage. En faisant varier R entre 0 et l'infini, nous disposons ainsi d'un second modèle intermédiaire entre le réacteur piston et le réacteur agité continu [5].

II.2.1.applications aux réactions auto catalytiques

Très schématique, une réaction auto-catalytique obéit à un mécanisme du type $A+R \rightarrow R+R$.

C'est le cas de certaines réactions biologiques qui se font sous l'influence de microorganismes :

Substrat + microorganismes \rightarrow produits + davantage de microorganismes

Si l'on considère la chaleur de réaction comme un produit, l'accélération des vitesses sous l'influence de l'échauffement conduit aussi à un comportement auto-catalytique, ou plutôt "auto-thermique".

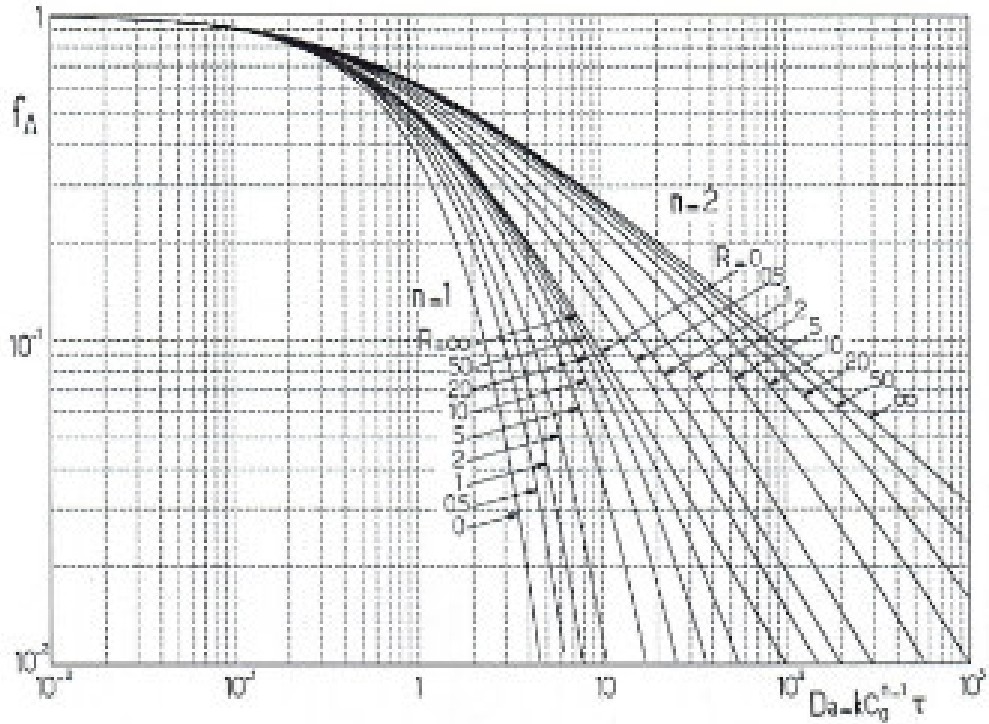


FIG.II.6 Fraction résiduelle à la sortie d'un réacteur piston à recyclage .réaction isotherme d'ordre $n=1$ et $n=2$ [5].

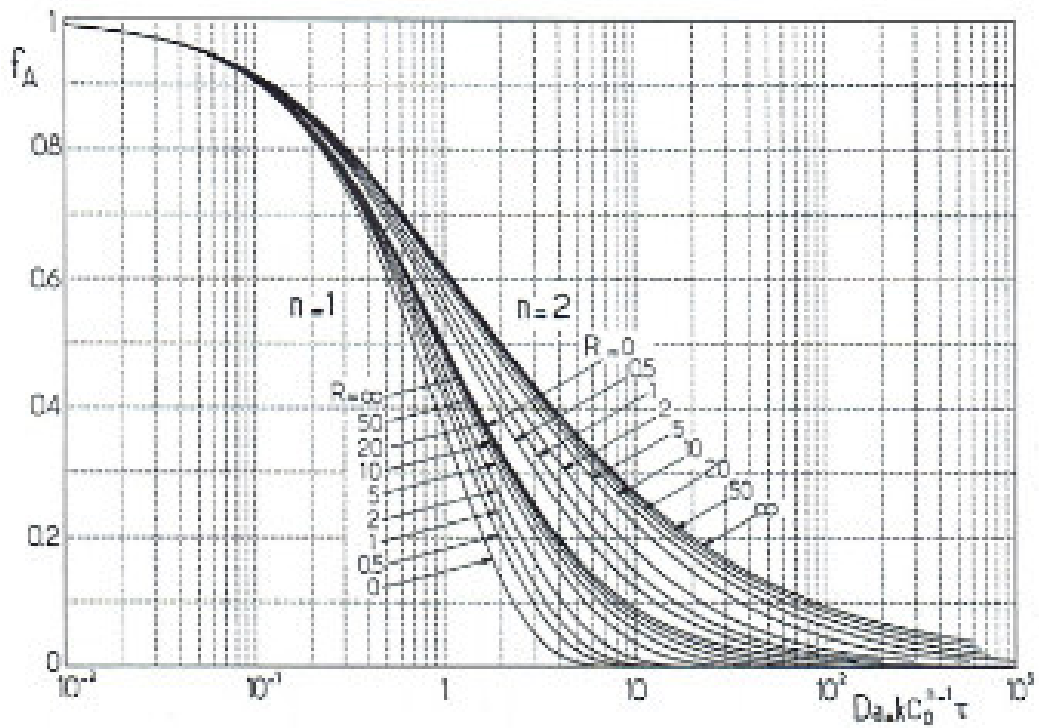


FIG.II.7.même cas que FIG.II.6.Echelle linéaire pour f_A [5]

Dans un réacteur fermé, l'avancement en fonction du temps présente une allure sigmoïde typique.

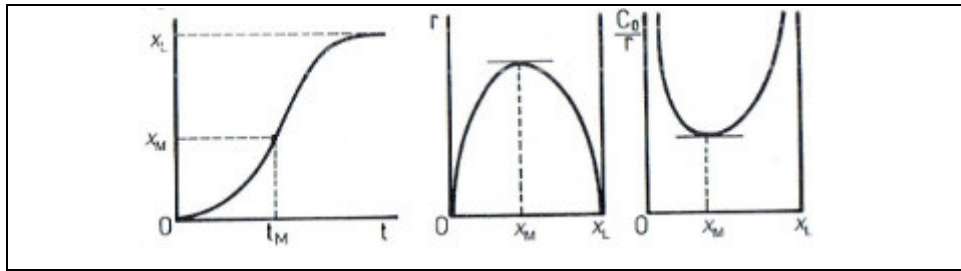


FIG.II.8.Réaction auto-catalytique [5].

La vitesse, d'abord quasi-nulle, passe par un maximum (t_M), pour s'annuler à nouveau par épuisement des réactifs. Il en résulte que la courbe C_0/r passe un minimum situé entre deux branches infinies.

Les schémas de la FIG.II.9 comparent quelques solutions pour obtenir une conversion élevée : réacteurs piston ou agité seuls, association d'un réacteur agité (fonctionnant au maximum de la vitesse) suivi d'un piston, réacteur (au maximum) suivi d'un réactif non converti qui est recyclé.

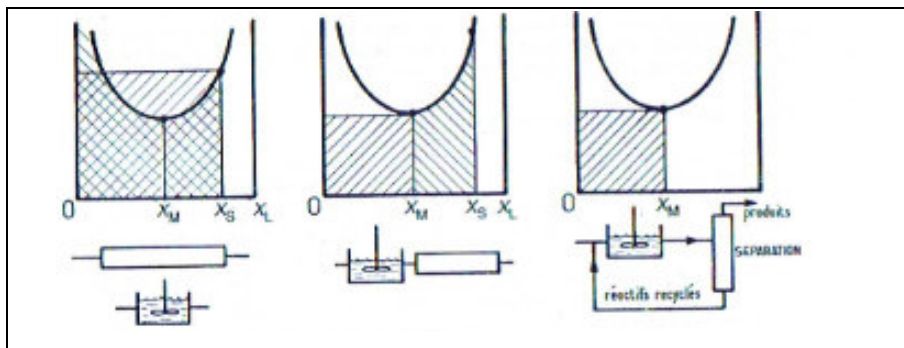


FIG.II.9.Optimisation d'une réaction auto-catalytique

Pour $X_S < X_M$, le réacteur agité est préférable au réacteur piston. La conclusion symétrique est vraie pour $X_S > X_M$. Mais les deux dernières formules sont particulièrement avantageuses à forte conversion.

Le réacteur piston à recyclage est intéressant dans la mise en œuvre des réactions auto-catalytiques car le recyclage ramène à l'entrée une quantité de produits catalytiques qui permet à la réaction de démarrer. La conversion en sortie X_S étant fixée, il existe un taux de recyclage optimal qui permet de réaliser l'opération avec un temps de passage minimal.

il s'agit de minimiser τ dans (II.26) en choisissant R à X_S donné, compte tenu de la forme particulière de la loi de vitesse. le problème peut être traité mathématiquement. la solution est matérialisée sur la FIG.II.8, analogue à la FIG.II.2.A l'optimum, $A=X_1$ avancement à l'entrée; les surfaces hachurées sont égales; la surface OBCG est égale au temps de passage τ optimal. Ceci revient à dire que $1/r$ à l'entrée est égale à la valeur moyenne de $1/r$ dans tout le réacteur [4].

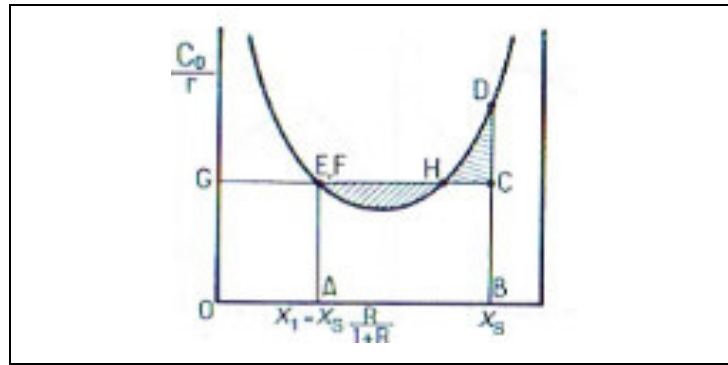


FIG.II.10. Optimisation d'une réaction auto-catalytique à l'aide d'un réacteur piston à recyclage [5].

II.3.REACTEUR PISTON A ALIMENTATION ETAGEE

Soit V_{RS} le volume totale de réacteur et plançons-nous au volume courant V_R . Par hypothèse le flux d'alimentation F_{j0} du chaque constituant A_j est répartie le long de l'axe selon une fonction g_j est 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 $g_j(z), g_l(z)$ 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 $V_R + dV_R$:

$$F_j + dF_{jE} + V_j r dV_R = F_j + dF_j$$

$$X_{K-1} = X_k - \frac{\tau_k r_k}{c_0} = X_k - f(X_k) \tag{II.30}$$

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

$$F_j = g_j F_{j0} + V_j F_0 X \tag{II.31}$$

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

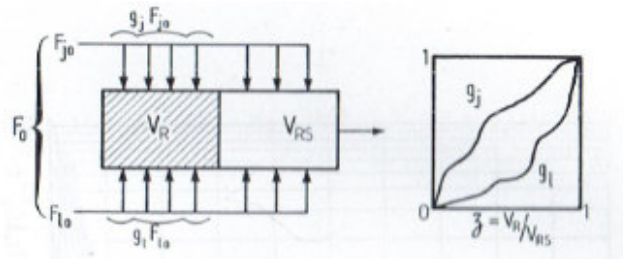


FIG II.11.: Réacteur a alimentation et étagée [5].

A partir de (II. 28) et(II.30), on obtient une équation de bilan formellement identique à celle du réacteur piston avec alimentation à l’entrée :

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

Ou encore

$$\frac{dX}{dV_R} = R(X, z) \tag{II. 32}$$

Ou l’on posé :

$$R = r \frac{V_{RS}}{F_o} = \frac{rt}{C_o} \tag{II. 33}$$

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 comme nous allons le voire maintenant [5].

• 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 :

$$\frac{PQ}{P_o Q_o} = \frac{F + F_1}{F_o + F_1}$$

Ou \$F = \sum_j F_j\$ est le flux local d’actifs et \$F_1\$ le flux d’inertes. A partir de ces expressions et de (II.30) on obtient :

$$C_j = \frac{C_o}{\beta} \frac{(g_j y_{j0} + v_j)}{\sum_j g_j y_{j0} + X \Delta v} \tag{II. 34}$$

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.31) 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.29) entre $z=0$ ($X=X_E$) et $z=1$ ($X=X_s$) [5].

- **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 locale est $Q = \sum_j Q_j = \sum_j g_j Q_{j0}$.

D'où la concentration :

$$C_j = \frac{F_j}{Q} = \frac{g_j F_{j0} + v_j F_o X}{\sum_j g_j Q_{j0}} \quad (\text{II. 33})$$

On peut donner diverses formes à cette expression, par exemple en introduisant les fractions de débit volumique $q_{j0} = \frac{Q_{j0}}{Q_o}$:

$$C_j = C_o \frac{g_j y_{j0} + v_j X}{\sum_j g_j q_{j0}} \quad (\text{II. 34})$$

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 :

$$F_{j0} = C'_{j0} Q_{j0} = C_{j0} Q_o = y_{j0} F_o \quad (\text{II. 35})$$

L'une quelconque de ces expressions $C_j(X, z)$ permet la résolution de l'équation de bilan (II.31).

Exemple :

On met en œuvre la réaction de second ordre isotherme en phase liquide $A+B \rightarrow$ produits dans un réacteur piston. Le débit de A est introduit en totalité à l'entrée, 1/3 du débit à l'entrée, 1/3 du débit au 1/6 du volume et le reste à la moitié du volume. Calculons le taux de conversions en sortie, sachant que l'excès stœchiométrique est $M=F_{B0}/F_{A0}$ et que les deux débits sont Q_{A0} et Q_{B0} .

Afin de montrer que l'avancement normalisé X n'est pas un paramètre obligatoire, traitons le problème en termes du taux de conversion X_A de A.

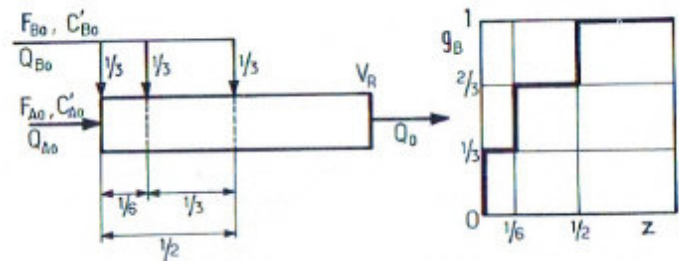


FIG II.12. Exemple d'alimentation étagée d'un réacteur piston [5].

La fonction $g_A(z)$ est un échelon-unité. L'allure de $g_B(z)$ est indiquée sur la FIG II.12. Les concentrations s'écrivent :

$$C_A = \frac{F_{A0}(1-X_A)}{Q_{A0} + g_B Q_{B0}} = \frac{C_{A0}(1-X_A)}{q_{A0} + g_B q_{B0}} = \frac{C_{A0}(1-X_A)}{1 + g_B q_{B0}/q_{A0}}$$

$$C_B = \frac{g_B F_{B0} - F_{A0} X_A}{Q_{A0} + g_B Q_{B0}} = \frac{C_{A0}(M g_B - X_A)}{q_{A0} + g_B q_{B0}} = \frac{C_{A0}(M g_B - X_A)}{1 + g_B q_{B0}/q_{A0}}$$

Où

$$q_{A0} = Q_{A0}/Q_0, \quad q_{B0} = Q_{B0}/Q_0, \quad Q_0 = Q_{A0} + Q_{B0}$$

$$F_{B0} = C_{A0} Q_0 = C'_{A0} Q_{A0}$$

Si la vitesse de la réaction est $r = k C_A C_B$, l'équation de bilan à résoudre est :

$$\frac{dX_A}{dz} = \frac{\tau r}{C_{A0}} = Da \frac{(1-X_A)(M g_B - X_A)}{(q_{A0} + g_B q_{B0})^2}$$

Où $Da = k C_{A0} \tau$, $\tau = V_R/Q_0$

L'équation devra être intégrée dans les trois intervalles :

$$0 < z < 1/6, \quad g_B = 1/3, \quad \text{d'où} \quad 0 < X_A < X_{A1}$$

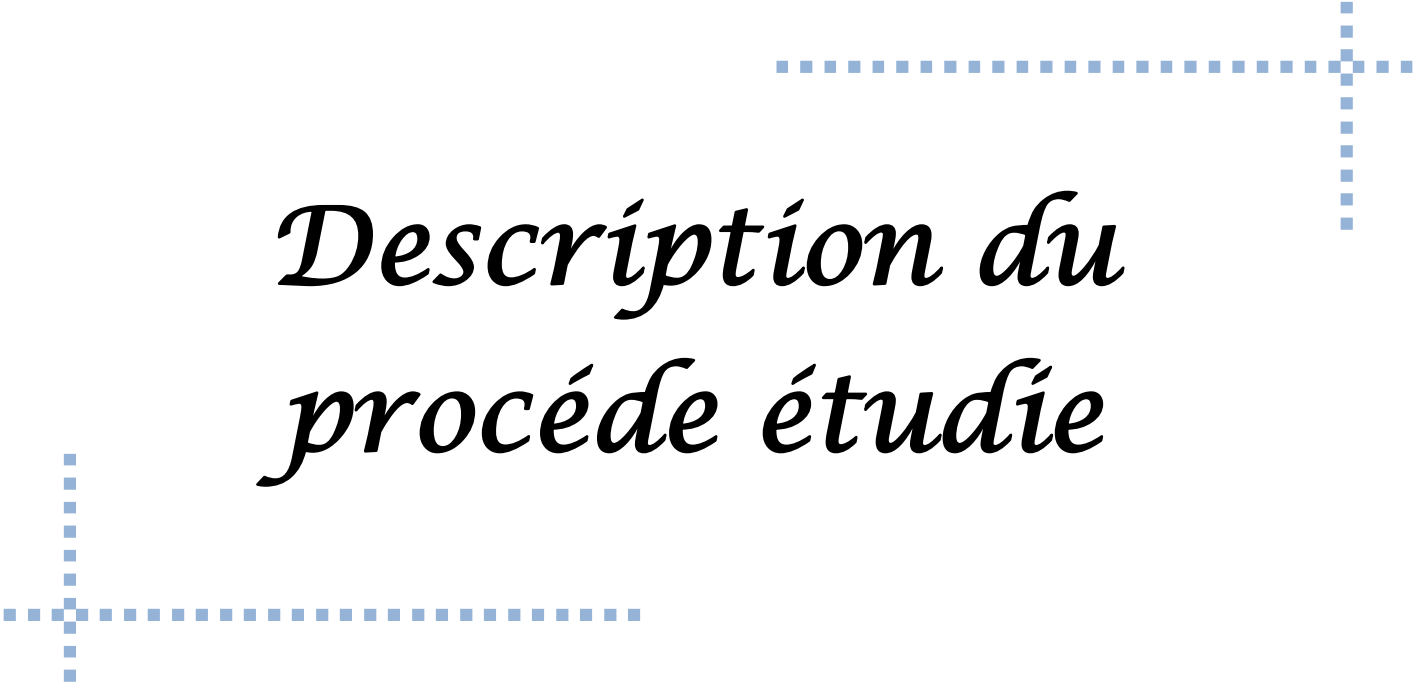
$$1/6 < z < 1/2, \quad g_B = 2/3, \text{ d'où } X_{A1} < X_A < X_{A2}$$

$$1/2 < z < 1, \quad g_B = 1, \text{ d'où } X_{A2} < X_A < X_{A3} \text{ cherché}$$

Remarquons que τ ne s'identifie pas ici au temps de séjours du fluide dans le réacteur [5].

CHAPITRE III :

Description du procédé étudié



CHAPITRE III : DESCRIPTION DU PROCÉDE ETUDIE

III.1. INTRODUCTION

Dans ce chapitre, on va commencer par décrire le procédé étudié ensuite on présentera son modèle mathématique ainsi que les méthodes 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.

III.2. MODEL MATHEMATIQUE

Le procédé étudié est constitué d'un réacteur à écoulement piston dans lequel le courant d'alimentation du co-réactif B est étagée et le courant d'alimentation du réactif A se fait d'une manière normale ou conventionnelle et cela pour des raisons de stabilité thermique (réaction très exothermique) ou pour des raisons de sélectivité de la réaction (accroissement de la concentration d'un produit désiré). La figure III.1 montre un réacteur à écoulement piston avec alimentation étagée du co-réactif B.

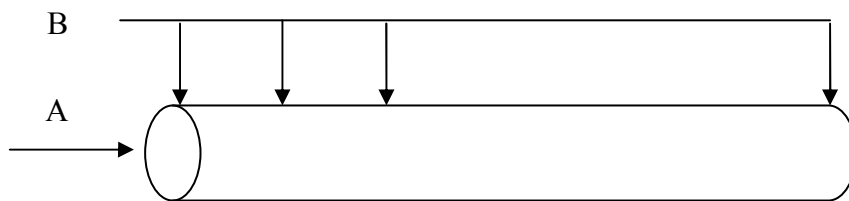


FIG.III.1. Montre un réacteur à écoulement piston avec alimentation étagée du Co-réactif B.

III.3. METHODES NUMERIQUES DE RESOLUTION DU MODELE DYNAMIQUE DU PROCÉDÉ

Le modèle mathématique du procédé se résume essentiellement à l'équation différentielle suivante :

$$\frac{dX_A}{dz} = \frac{\tau r}{C_{A0}} = Da \frac{(1 - X_A)(M_{gB} - X_A)}{(q_{A0} + g_{B0} q_{B0})^2}$$

Ou : $Da = k C_{A0} \tau$, $r = k C_A C_B$, et $\tau = V_R / q_0$

Cette équation différentielle devra être intégrée dans les trois intervalles suivants:

$$\begin{aligned} 0 < z < 1/6, & \quad g_{B1}=1/3, \text{ d'où } \quad 0 < X_A < X_{A1} \\ 1/6 < z < 1/2, & \quad g_{B2}=2/3, \text{ d'où } \quad X_{A1} < X_A < X_{A2} \\ 1/2 < z < 1, & \quad g_{B3}=1, \text{ d'où } \quad X_{A2} < X_A < X_{A3} \text{ cherché} \end{aligned}$$

Pour chaque valeur de l'abscisse axiale adimensionnelle z , la méthode d'Euler a été appliquée à l'équation différentielle

$$\frac{dX_A}{dz} = \frac{\tau r}{C_{A0}} = D \alpha \frac{(1 - X_A)(M_{gB} - X_A)}{(q_{A0} + g_{B0} q_{B0})^2}$$

Et cela afin de déterminer la valeur du taux de conversion X_A [5].

III.4. ALGORITHME UTILISE DANS LA SIMULATION

L'algorithme se résume par les étapes suivantes :

Étape I : initialisation des paramètres

$n=100$	(nombre de nœuds = nbre de pts du maillage)
$T=708$	(température moyenne °K)
$q_{B0} = 100$	(débit volumique du réactif B en litre/minute)
$q_{A0} = 100$	(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)
$k = 100$	(constante cinétique de 2 ^{ème} ordre en litre / (mole. minute)
$g_{B1} = 1/3$	
$g_{B2} = 2/3$	
$g_{B3} = 1$	
$q = q_{B0} + q_{A0}$	
$V_R = 1000$	(volume du réacteur en litres)
$z_{\min} = 0$	(valeur minimale de l'abscisse adimensionnelle à l'entrée)
$z_{\max1} = 1/6$	($z_{\max1} = 1/6$)
$z_{\max2} = 1/2$	($z_{\max2} = 1/2$)
$z_{\max3} = 1$	($z_{\max3} = 1$)

Étape II :

$$q = q_{B0} + q_{A0}$$

$$F_{A0} = C_{A0} * Q_{A0}$$

$$F_{A0} = C_{B0} * Q_{B0}$$

$$q_{A0} = q_{A0}/q$$

$$q_{B0} = q_{B0}/q$$

$$\tau = V_R/Q$$

$$Da = k * C_{A0} * \tau$$

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

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

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

Étape III :

$$a = z_{\min}$$

$$b = z_{\max 1}$$

$$dz_1 = (b-a) / (n-1) \quad (\text{pas d'intégration})$$

$$X_1 = 0$$

$$z_1 = 0$$

Tant que $z_1 \leq z_{\max 1}$ faire

$$dX_1 = dz_1 * ((Da * (1-X_1) * (M_{gB1} - X_1)) / ((q_{A0} + g_{B1} * q_{B0}) . ^2))$$

$$X_1 = X_1 + dX_1$$

$$z_1 = z_1 + dz_1$$

Fin tant que

Étape VI :

$$dz_2 = (z_{\max 2} - z_{\max 1}) / (n-1) \quad (\text{pas d'intégration})$$

$$X_2 = X_1$$

$$z_2 = z_1$$

Tant que $z_2 \leq z_{\max 2}$

$$dX_2 = dz_2 * ((Da * (1-X_2) * (M_{gB2} - X_2)) / ((q_{A0} + g_{B2} * q_{B0}) . ^2))$$

$$X_2 = X_2 + dX_2$$

$$z_2 = z_2 + dz_2$$

Fin tant que

Étape V :

$$dz_3 = (z_{\max 3} - z_{\max 2}) / (n-1) \quad (\text{pas d'intégration})$$

$$X_3 = X_2$$

$$z_3 = z_2$$

Tant que $z_3 \leq z_{\max 3}$

$$dX_3 = dz_3 * ((Da * (1 - X_3) * (Mg_{B3} - X_3)) / ((q_{A0} + g_{B3} * q_{B0}) \cdot a.^2))$$

$$X_3 = X_3 + dX_3$$

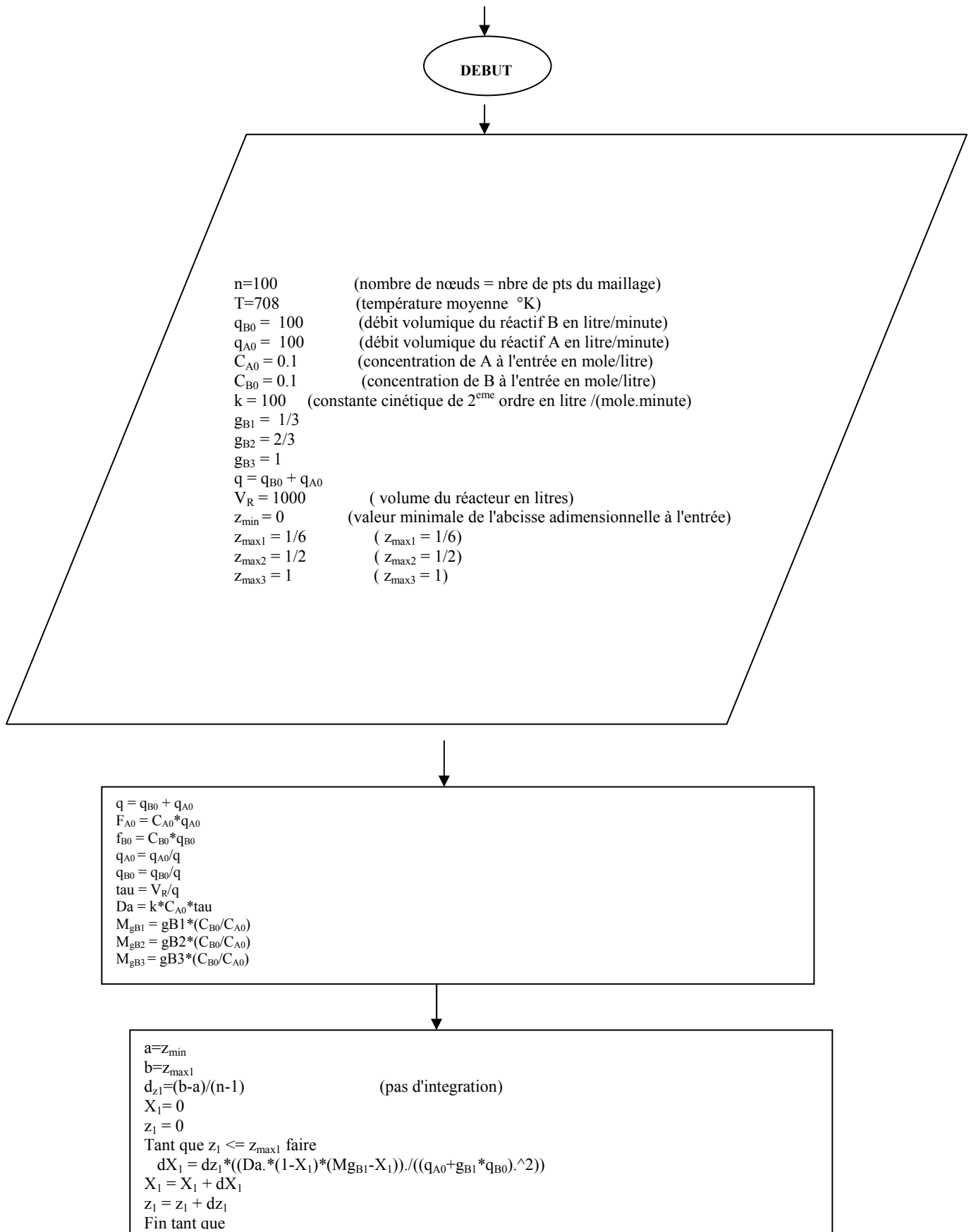
$$z_3 = z_3 + dz_3$$

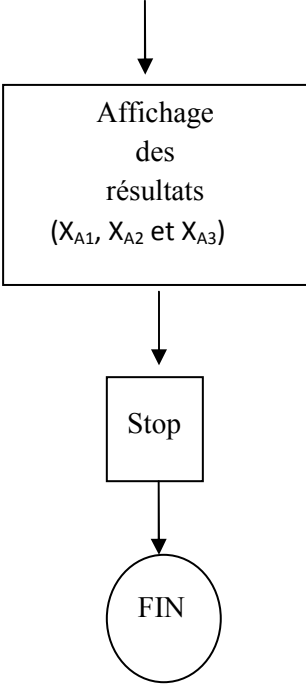
Fin tant que

Étape IV

Afficher les résultats trouvés (X_{A1} , X_{A2} et X_{A3})

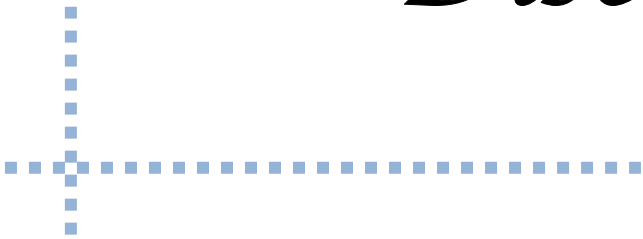
III.5. ORGANIGRAMME UTILISÉ DANS LA SIMULATION





CHAPITRE IV:

*Résultats Et
Discussion*



IV.1. INTRODUCTION

Dans ce chapitre, on va étudier l'influence des paramètres opératoires sur la valeur de conversion on utilisant un programme de matlabs.

IV.2. Interprétation des résultats

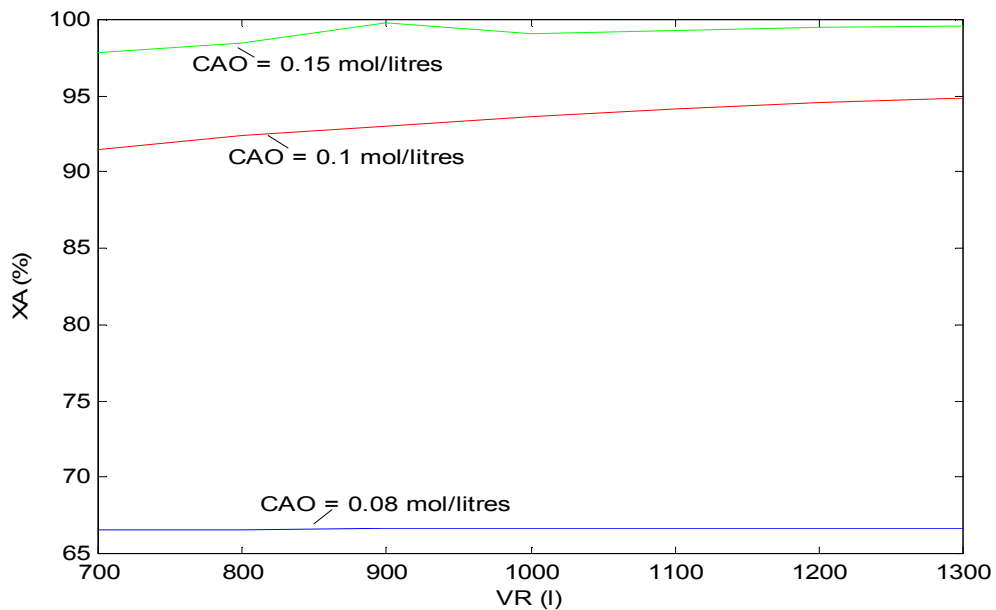


Figure V.1: Variation de X_A en fonction du volum V_R pour différentes valeurs de C_{A0}

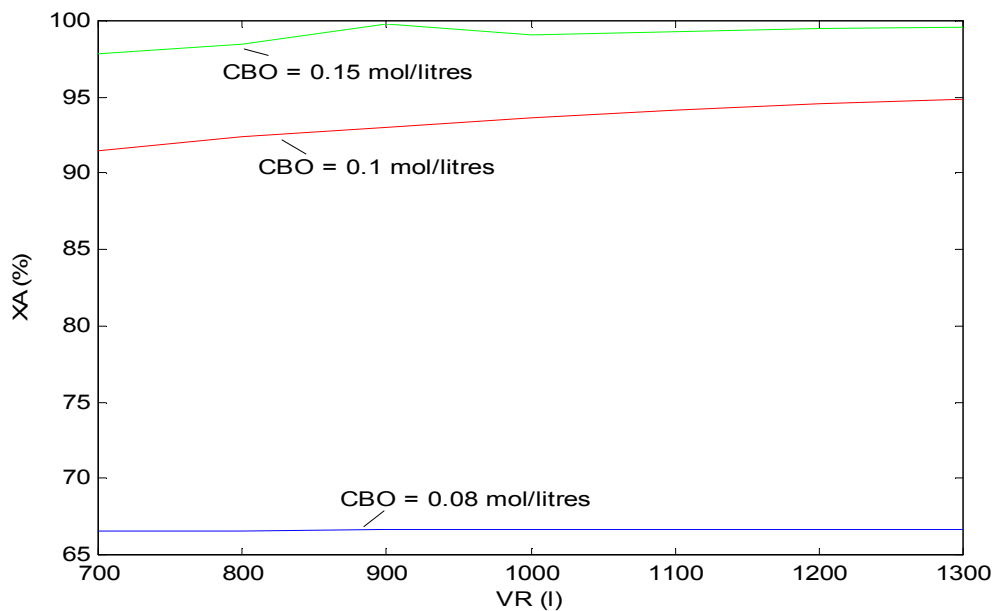


Figure V.2. Variation de X_A en fonction du volum V_R pour différentes valeurs de C_{B0}

D'après la figure VI.1 on remarque qu'à V_R donné (volume du réacteur constant), X_A augmente si C_{A0} augmente. Ceci est acceptable car C_{A0} est la concentration du réactif A dans le courant d'alimentation du réacteur. Il ressort aussi de cette dernière figure que pour X_A donné, V_R diminue si C_{A0} augmente. Donc pour avoir un taux de conversion donné (fixé), il faut augmenter C_{A0} pour avoir un faible volume du réacteur afin minimiser le prix de revient de ce dernier. Les mêmes remarques et conclusions s'appliquent également pour le réactif B comme l'illustre la figure IV.2.

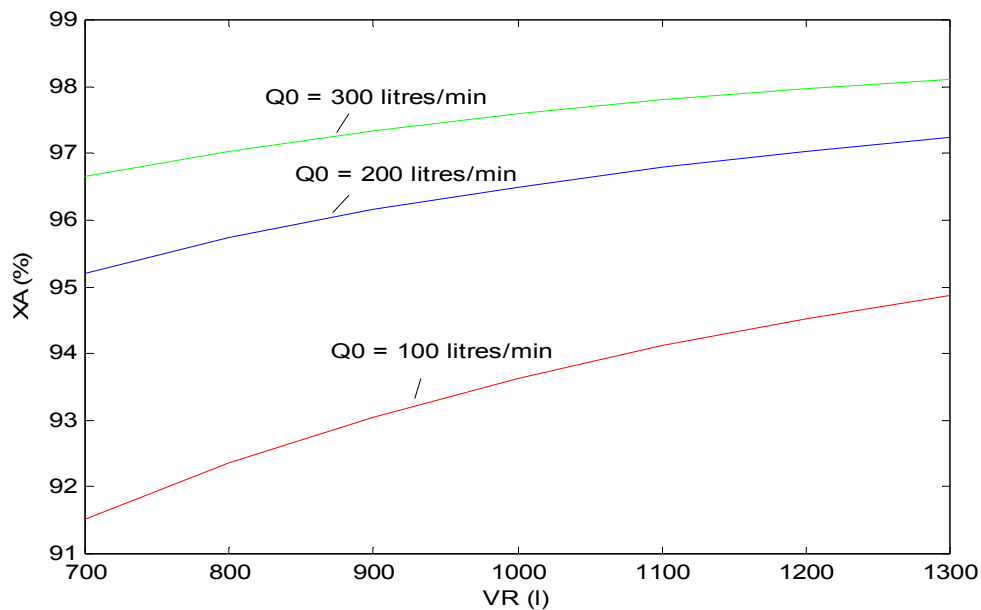
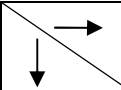


Fig IV.3. Variation de X_A en fonction du volum V_R pour différentes valeurs du débit Q_0 .

La figure IV.3 montre qu'à V_R donné ou fixé, le taux de conversion augmente quand le débit volumique augmente. Il ressort également de cette figure que pour un taux de conversion donné (donc X_A constant), le volume réactionnel diminue si le débit Q_0 augmente. Donc pour un taux de conversion désiré, pour minimiser le volume du réacteur à utiliser, il faut travailler avec un débit volumique Q_0 élevé. Donc à X_A fixé, il faut travailler aux hauts débits pour minimiser V_R .

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

	Valeur obtenue du taux de conversion a la sortie X_3 (%)
$z=0$ $z=3/4$ $z=0.9$	87.43
$z=0$ $z=1/6$ $z=3/4$	93.53
$z=0$ $z=1/3$ $z=2/3$	94.99
$z=0$ $z=1/6$ $z=1/2$	96.5
$z=0$ $z=1/8$ $z=1/4$	97.60

Le tableau IV.1 présente les différentes valeurs obtenues du taux de conversion à la sortie du réacteur pour différentes répartitions de l'alimentation étagée du co-réactif B. On remarque que le taux de conversion augmente quand la répartition de l'alimentation du co-réactif B se resserre en se rapprochant de l'entrée du réacteur (fig.IV.4), ceci est acceptable car le réacteur piston à avec alimentation conventionnelle ou classique est plus performant que le réacteur piston à alimentation étagée, mais ce dernier devient nécessaire si on a affaire à une réaction très exothermique pour laquelle il serait impossible de mélanger directement deux réactifs sans rencontrer de graves problèmes de sécurité et de stabilité thermique du réacteur et des produits à fabriquer

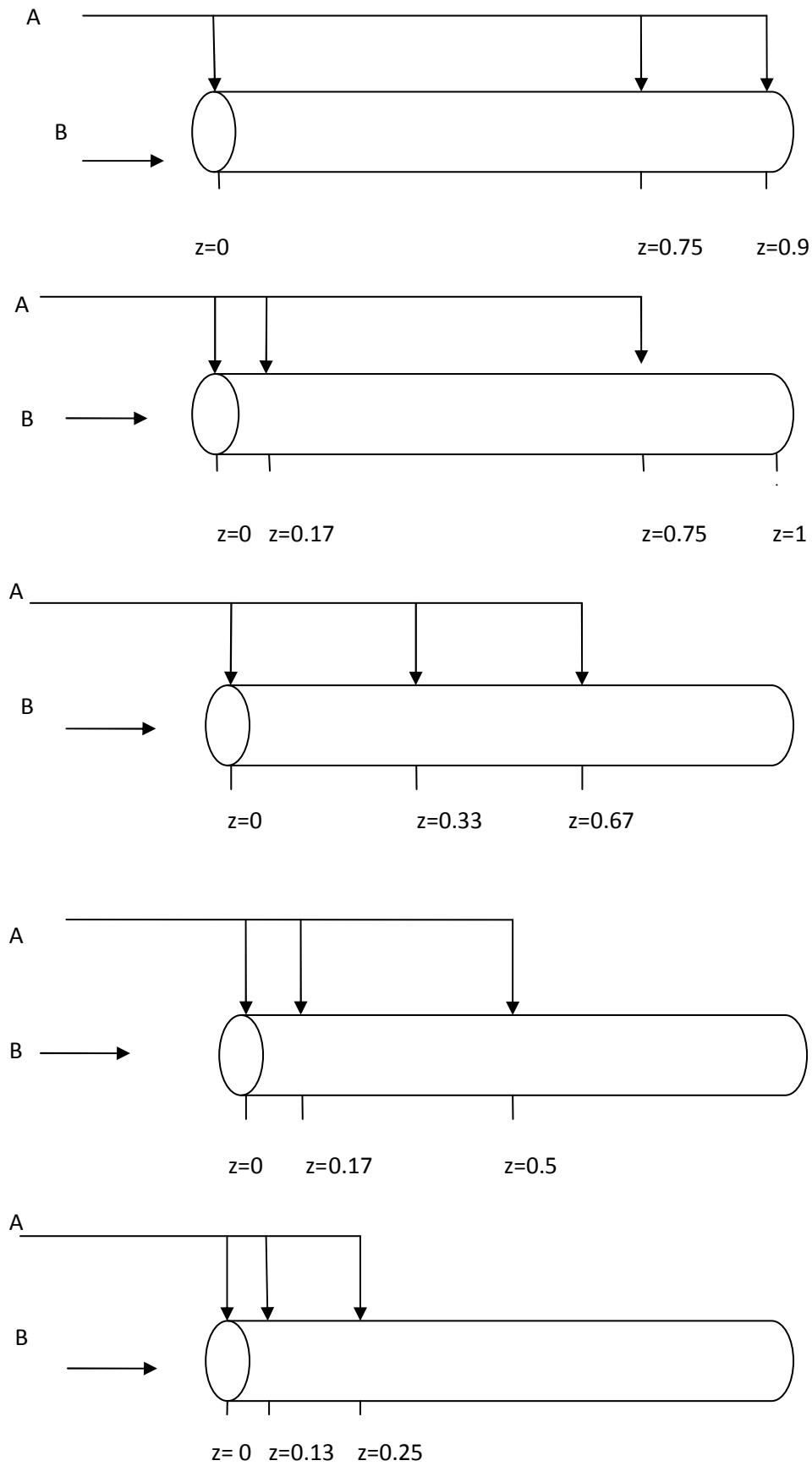
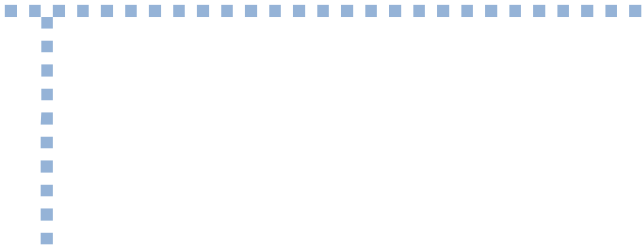


FIG.IV.4. différents répartitions étudiées de l'alimentation étagée du Co-réactif B

Conclusion générale



Conclusion générale

Notre travail a consisté à étudier un réacteur à écoulement piston avec alimentation. L'alimentation étagée devient nécessaire dans le cas où la réaction chimique est fortement exothermique et où il serait impossible alors de mélanger directement les réactifs. L'objectif de ce travail a consisté à calculer le taux de conversion du réactif clé à la sortie du réacteur et à étudier l'influence de la répartition de l'étagement de l'alimentation sur le taux de conversion à la sortie du réacteur.

Les résultats obtenus par simulation nous permettent de conclure que le taux de conversion dépend de la fonction d'étagement du co-réactif. D'autre part, le taux de conversion à la sortie dépend aussi du volume du réacteur (V_R), des concentrations des réactifs (C_{A0} et C_{B0}) et du débit volumique d'alimentation (Q_0). Il a également été trouvé que le taux de conversion augmente quand la répartition de l'alimentation du co-réactif (B) se resserre en se rapprochant de l'entrée du réacteur, cela s'explique par le fait que le réacteur piston à avec alimentation conventionnelle est plus performant que le réacteur piston avec alimentation étagée, mais ce dernier devient plus concurrentiel ou plus compétitif dans le cas d'une réaction très exothermique ou dans le cas où il y a des problèmes de sélectivité.

Références bibliographiques

- [1] **E.KOLLER**, « Aide-Mémoire Génie Chimique », Paris, Dunod, 3^{ème} édition, 2001, 2005, 2009, pp 546-559.
- [2] **E.KOLLER**, « Aide-Mémoire Génie Chimique», Paris, Dunod, édition, (2010).
- [3] **N.Frikha**, « conduite de la réaction chimique en réacteurs discontinus : application la réaction s catalytique homogène et hétérogènes. Stabilité thermique », thèse de doctorat, Ingénieur de l'école national d'ingénieur de gabés –Tunisie, (2005), pp 10-11.
- [4] **J. VILLERMAUX**, « Réacteurs chimiques », Technique de l'ingénieur, J4010, pp 2-3
- [5] **J. VILLERMAUX**, « Génie de la réaction chimique conception et fonctionnement des réacteurs », Paris, 2^{me} édition, (1993), pp 71-126.