

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

## MEMOIRE DE MASTER

Domaine: sciences et techniques  
Filière: Génie des procédés  
Spécialité des procédés de l'environnement

### THÈME

# Etude d'un réacteur agité continu (RAC) à phase gaz

Présentée par:

Benfarhat Malak

Devant le jury composé de:

Président: Pr. BERKAT Djamel

Univ. Biskra

Examineur: Dr. MERZOUGUI Abdelkrim

Univ. Biskra

Encadreur: Dr. BENDJAOUHDOU Chaouki

Univ. Biskra

Promotion: 2020

## Résumé

Dans ce mémoire on a étudié par simulation l'influence de paramètres tels que la température régnante dans le réacteur (T), le volume du réacteur (V), le débit volumique du gaz à l'entrée du réacteur ( $F_0$ ), la pression du gaz à l'entrée du réacteur ( $P_0$ ) et la pression en aval du réacteur ( $P_D$ ) sur le fonctionnement d'un réacteur de type RAC à phase gaz. Les résultats trouvés ont montré comment devraient être ces paramètres pour avoir un taux de conversion maximal dans le réacteur.

**Mots clé:** réacteur, RAC, conversion, débit volumique, pression du gaz, simulation.

## Abstract:

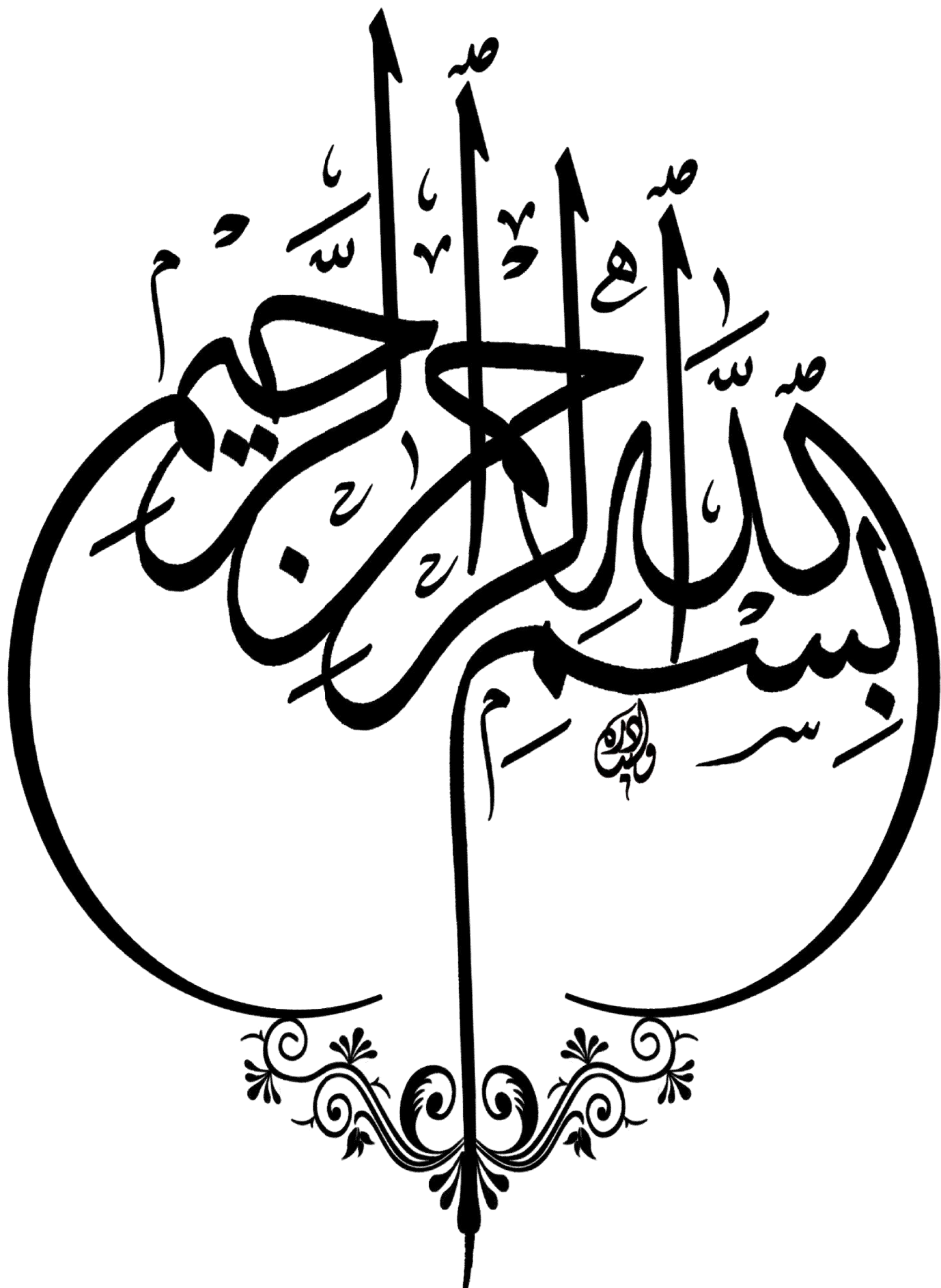
In this thesis we studied by simulation the influence of parameters such as temperature reactor (T), reactor volume (V), volumetric flowrate at reactor entrance ( $F_0$ ), gas pressure at reactor entrance ( $P_0$ ) and reactor downstream gas pressure ( $P_D$ ) on the functioning of a gas phase CSTR reactor. The obtained results showed how would be these parameters to obtain a maximal conversion in the reactor.

**Keywords:** reactor, CSTR, conversion, flowrate; gas pressure, simulation.

## ملخص:

في هذه الأطروحة درسنا بواسطة المحاكاة تأثير إعدادات مهمة على تشغيل مفاعل متجانس مستمر ذو طور غازي. الإعدادات هي: درجة حرارة المفاعل (T)، حجم المفاعل (V)، التدفق الحجمي عند مدخل المفاعل ( $F_0$ ) ضغط الغاز عند مدخل المفاعل ( $P_0$ ) وضغط الغاز عند مخرج المفاعل ( $P_D$ ). النتائج المتحصل عليها تشير كيف يجب أن تكون هذه الإعدادات للحصول على أقصى درجة التحول داخل المفاعل.

**الكلمات المفتاحية:** مفاعل متجانس مستمر، درجة التحول، التدفق الحجمي. ضغط الغاز، محاكاة.



# *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 BARKET 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.***

# *Dédicace*

*Je dédie ce mémoire :*

*A mes très chers parents*

*A mes frère et mes sœur*

*A toute ma famille*

*A mon mari*

*A mes amis : **NOUR, HANOU, SOUMIA et BOUTHAINA.***

*Ainsi qu'a tous mes professeurs, enseignants*

*Et tous mes amis du primaire*

*Jusqu'à l'université.*

**MALAK**

# *Sommaire*

<b>INTRODUCTION GENERALE</b>	<b>01</b>
<b>Chapitre I: GÉNÉRALITÉS SUR LES RÉACTEURS</b>	
I.1. Introduction	03
I.2. Définition Des Réacteurs Chimiques	03
I.3. Classification Des Réacteurs Chimiques	03
I.3.1. Classification selon le type de réacteur	03
I.3.1.1. Réacteur cuve	03
I.3.1.2. Réacteur tube ou réacteur tubulaire	04
I.3.2. Classification selon le type d'opération	04
I.3.2.1. Opération continue	04
I.3.2.2. Opération discontinue	05
I.3.2.3. Opération semi-continue	05
I.3.3. Classification des réacteurs selon le type de Réaction	06
I.3.3.1. Phase homogène gazeuse	06
I.3.3.2. Phase homogène liquid	07
I.3.3.3. Phases hétérogènes gaz-solide	07
I.3.3.4. Phases hétérogènes gaz-liquide	08
I.3.3.5. Phases hétérogènes liquide-liquide	08
I.3.3.6. Phases hétérogènes liquide-solide	08
I.3.3.7. Phases hétérogènes gaz-liquide-solide	08
I.3.3.8 Circulation des phases	08
I.4. Facteurs Gouvernant Le Fonctionnement D'un Réacteur Chimique	09
I.4. LES CRITERES DE CHOIX D'UN RÉACTEUR CHIMIQUE	10
<b>Chapitre II: LE RÉACTEUR A CUVE AGITÉ CONTINU (RAC)</b>	
II.1. INTRODUCTION	13
II.2. NOTION GÉNÉRALE SUR LE REACTEUR DE TYPE RAC	13

II.3. BILANS MASSIQUES ET ENERGETIQUES DANS UN REACTEUR RAC	<b>16</b>
II.4. LE REACTEUR ÉTAGÉ	<b>16</b>
II.5. DIVERSES TECHNOLOGIES UTILISABLES	<b>16</b>
II.5.1. Cuve agitée mécaniquement	<b>17</b>
II.5.2. Cuve munie d'une circulation externe	<b>18</b>
<b>Chapitre III: DESCRIPTION DU PROCÉDÉ ÉTUDIÉ</b>	
III.1. Introduction	<b>21</b>
III.2. Présentation Du Procédé	<b>21</b>
III.3. Modele Mathematiques Du Procédé Et Methodes De Resolution	<b>21</b>
III.4. Algorithme Utilise Dans La Simulation	<b>23</b>
III.5. Organigramme General Utilisé Dans La Simulation	<b>24</b>
<b>Chapitre IV: RESULTATS ET DISCUSSION</b>	
IV.1. Introduction	<b>26</b>
IV.2. Taux de conversion XAs en fonction du coefficient de la vanne $C_v$ pour différentes valeurs de la pression $P_D$ régnante dans le réservoir de stockage du produit	<b>27</b>
IV.3. Taux de conversion XAs en fonction du coefficient de la vanne $C_v$ pour différentes valeurs de la temperature $T$ régnante dans le réacteur	<b>28</b>
IV.4. Taux de conversion XAs en fonction du coefficient de la vanne $C_v$ pour différentes valeurs du volume $V$ du réacteur	<b>29</b>
IV.5. Taux de conversion XAs en fonction du coefficient de la vanne $C_v$ pour différentes valeurs du débit volumique $F_o$ à l'entrée du réacteur	<b>30</b>
IV.6. Taux de conversion XAs en fonction du coefficient de la vanne $C_v$ pour différentes valeurs de la pression $P_o$ à l'entrée du réacteur	<b>31</b>
<b>CONCLUSION GENERALE</b>	<b>33</b>
<b>RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES</b>	<b>35</b>

## LISTE DES FIGURES

Figure	Titre	Page
FIG.I.1	Réacteur cuve	04
FIG.I.2	Réacteur tubulaire	04
FIG.I.3	Opération continue	05
FIG.I.4	Opération discontinue	05
FIG.I.5	Opération semi-continue	06
FIG. I.6	Facteurs gouvernant le fonctionnement d'un réacteur chimique	10
FIG.II.1	schéma de principe d'un réacteur RAC	13
FIG.II.2	schéma de réacteur continu parfaitement agité du type cuve à agitation mécanique	17
FIG.II.3	Schéma d'un réacteur étagé à agitation mécanique (6 étage en série)	18
FIG.II.4	Schéma de réacteur continu parfaitement agité à boucle de circulation ( $A_1, A_2, A_3$ trois possibilités d'alimentation en réactif. $S_1, S_2, S_3$ trois possibilités de soutirage du milieu réactionnel. $Q$ : débit d'alimentation)	19
Figure III .1	Schéma simplifié du procédé étudié (Réacteur, Vanne, Réservoir)	21
Figure IV.1	Schéma simplifié du procédé étudié (Réacteur, Vanne, Réservoir)	26
Figure IV.2	Taux de conversion XAs en fonction du coefficient de la vanne $C_v$ pour différentes valeurs de la pression $P_D$ régnante dans le réservoir de stockage du produit	27
Figure IV.3	Taux de conversion XAs en fonction du coefficient de la vanne $C_v$ pour différentes valeurs de la température $T$ régnante dans le réservoir de stockage du produit	28
Figure IV.4	Taux de conversion XAs en fonction du coefficient de la vanne $C_v$ pour différentes valeurs du volume $V$ du réacteur.	29
Figure IV.5	Taux de conversion XAs en fonction du coefficient de la vanne $C_v$ pour différentes valeurs du débit volumique $F_o$ à l'entrée du réacteur $F_o$ .	30
Figure IV.6.	Taux de conversion XAs en fonction du coefficient de la vanne $C_v$ pour différentes valeurs de la pression $P_o$ à l'entrée du réacteur $F_o$ .	31



# ***INTRODUCTION GENERALE***

### INTRODUCTION GENERALE

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 le plus utilisé est le réacteur continu agité (RAC).

Dans ce mémoire nous allons étudier par simulation au moyen du logiciel Matlab l'influence de plusieurs paramètres opératoires sur le fonctionnement d'un réacteur de type RAC dans lequel se déroule une réaction équilibrée en phase gaz. Ce réacteur est couplé à travers une vanne à un réservoir de stockage du produit formé. On étudiera l'influence des paramètres opératoires les plus importants pour optimiser le fonctionnement du procédé considéré (réacteur, vanne, réservoir). Les résultats trouvés devraient nous permettre de savoir comment devraient être ces paramètres pour optimiser la capacité de production du procédé, c'est-à-dire avoir un taux de conversion maximale dans le réacteur.

# 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].

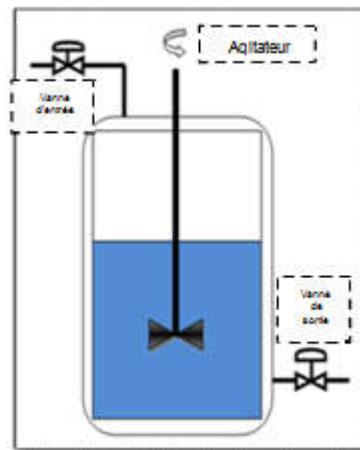


FIG.I.1. Réacteur cuve [1].

### 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].

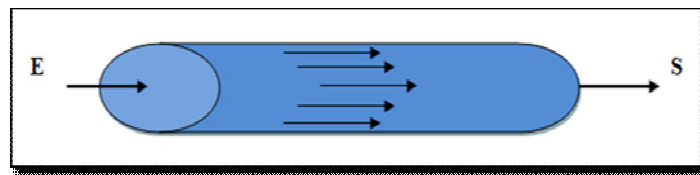


FIG.I.2. Réacteur tubulaire [1]

### 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].

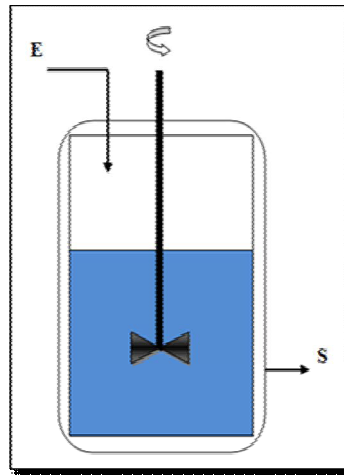


FIG.I.3. Opération continue [1]

### 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].

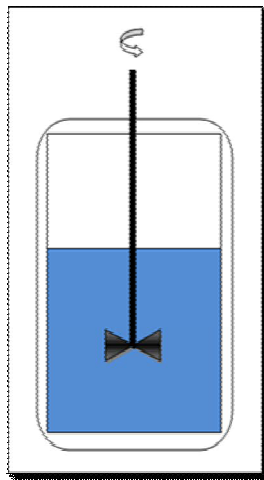


FIG.I.4. Opération discontinue [1].

### 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].

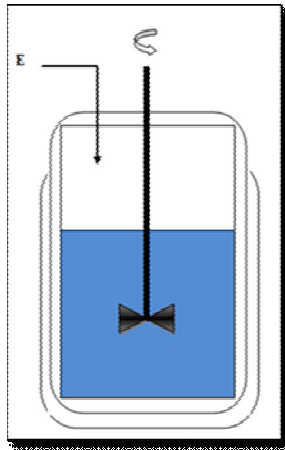


FIG.I.5. Opération semi-continue [1]

**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 CO<sub>2</sub> 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' $\alpha$ -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 (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 [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).

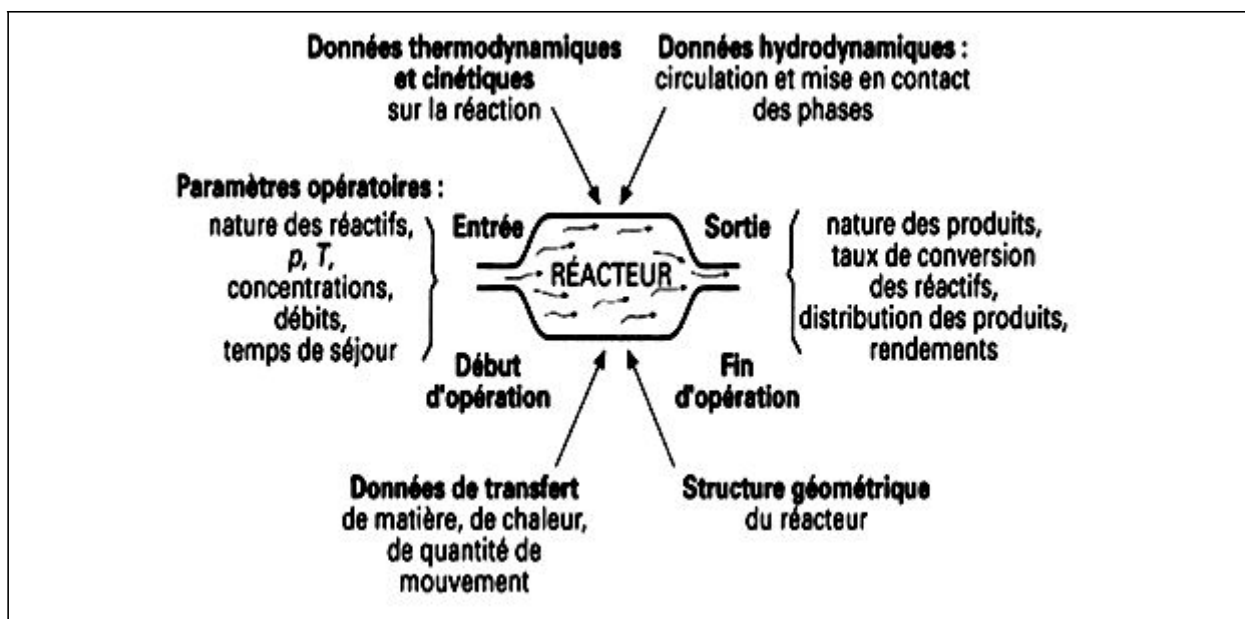


FIG. I.6. Facteurs gouvernant le fonctionnement d'un réacteur chimique [1].

#### I.4. LES CRITERES DE CHOIX D'UN RÉACTEUR CHIMIQUE

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 [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

## LE RÉACTEUR A CUVE AGITÉ CONTINU (RAC)

## II.1. INTRODUCTION

Dans ce chapitre on va présenter des notions générales relatives au réacteur à cuve agitée continu (RAC), on présentera également les bilans massiques et énergétique pour ce réacteur, et enfin, on citera les diverses technologies utilisables relatives à ce type de réacteur.

## II.2. NOTION GÉNÉRALE SUR LE REACTEUR DE TYPE RAC

Dans son principe, le fonctionnement d'un réacteur monophasique parfaitement agité est simple. On suppose qu'en tout point d'un tel appareillage les variables intensives, telles que concentration ou température, ont la même valeur. Par ailleurs ce même appareillage est doté d'une alimentation continue en réactifs et d'un soutirage continu permettant d'évacuer le mélange réactionnel contenant les produits de la réaction. Un tel réacteur peut être représenté schématiquement comme indiqué sur la figure II.1. Il comporte essentiellement une cuve munie d'un système d'agitation, d'une tubulure d'alimentation et d'une tubulure de soutirage [2].

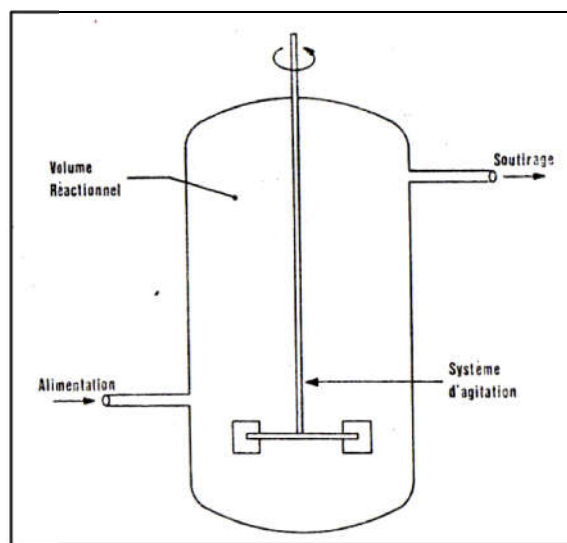


FIG.II.1. schéma de principe d'un réacteur RAC [2]

## II.3. BILANS MASSIQUES ET ENERGETIQUES DANS UN REACTEUR RAC

Supposons qu'une transformation chimique, symbolisée par  $\sum v_{ij}A_j=0$  se déroule dans le fluide contenu dans le réacteur schématisé au niveau de la figII.1. si l'on désigne par V le volume de fluide réactionnel contenu dans le réacteur, le bilan molaire de chaque composé  $A_i$  comptabilisé entre l'entrée et la sortie du réacteur pourra s'écrire en régime permanent [2] :

$$(F_i)_e - (F_i)_s + \mathcal{R}_i V = 0 \quad (i= 1, k) \quad (II.1)$$

Les indices (e) et (s) indiquent que la variable correspond respectivement aux conditions d'entrée ou de sortie. Le terme de vitesse de disparition  $\mathcal{R}_i$  sera exprimé sur la base des conditions régnantes dans l'ensemble du volume V et qui se retrouveront au niveau du soutirage, du fait de l'hypothèse de mélange parfait.

$$(\sum F_i h_i)_e - (\sum F_i h_i)_s + qV = 0 \quad (i= 1, k) \quad (II.2)$$

Si l'on utilise les deux relations générales suivantes [2]:

$$F_i = F_{i0} + \sum v_{ij} \xi'_j$$

avec  $i = 1, k, j = 1, R$

$$\mathcal{R}_i = \sum v_{ij} r_j$$

Les équations (II.1) et (II.2) peuvent se réécrire en assimilant  $(F_i)_e$  à  $F_{i0}$  et  $(F_i)_s$  à  $F_i$ :

$$\sum v_{ij} \xi'_j = \sum v_{ij} r_j V$$

ou encore :

$$\xi'_j = r_j V \quad (II.3)$$

on aura :

$$\sum F_{i0} [(h_i)_e - (h_i)_s] - \sum_i \sum_j v_{ij} \xi'_j (h_i)_s + qV = 0 \quad (II.4)$$

Dans ces équations les avancements molaires  $\xi'_j$  sont pris à la sortie du réacteur. La double somme de l'équation ci-dessus peut s'expliciter de la manière suivante :

$$\sum_i \sum_j v_{ij} \xi'_j (h_i)_s = \sum_j \Delta H_j \xi'_j \quad (II.5)$$

Les enthalpies de réaction  $\Delta H_j$  étant calculées pour les conditions régnant à l'intérieur du réacteur qui sont identiques à celles correspondant au fluide sortant.

L'équation (II.4) peut alors s'écrire :

$$\sum_i F_{i0} (\Delta h_i) - \sum_j \Delta H_j \xi'_j + qV = 0 \quad (II.6)$$

Le terme  $\Delta h_i$  traduit la différence des enthalpies molaires partielles entre l'entrée et la sortie du réacteur. L'équation (II.6) comprend trois termes correspondant aux trois composantes du bilan énergétique :

- 1<sup>er</sup> terme : apport ou élimination de chaleur par l'écoulement continu du fluide réactionnel ;
- 2<sup>e</sup> terme : effet thermique du à la transformation chimique ;
- 3<sup>e</sup> terme : échange d'énergie avec l'extérieur.

Dans la mesure où la variation d'enthalpie molaire partielle est essentiellement due aux variations de température, le premier terme peut s'écrire :

$$\sum F_{i0} \bar{C}_{pi} (T_{mf} - T_s)$$

$\bar{C}_{pi}$  étant la valeur moyenne  $C_{pi}$  entre  $T_e$  et  $T_s$ .

Quant au troisième terme, il s'exprimera le plus souvent, comme pour le cas des réacteurs discontinus, sous la forme d'un terme d'échange de chaleur, à savoir :

$$qV = U \Omega (T_{mf} - T_s) \quad (II.7)$$

La solution simultanée de (II.3) et (II.6) permet de calculer les valeurs de  $\xi'_j$  et de  $T_s$  ; pour effectuer cette résolution il faudra évidemment connaître toutes les caractéristiques du système réactionnel ( $r_j$ ,  $\Delta H_j$ ,  $C_{pi}$ ,  $v_{ij}$ ), ainsi que celles du réacteur ( $V$ ,  $U$ ,  $\Omega$ ,  $T_{mf}$ ). Les conditions opératoires seront définies par les valeurs de  $F_{i0}$  et de  $T_e$ .

Comme pour les autres types de réacteurs, on peut faire apparaître dans les équations ci-dessus certaines simplifications correspondant aux cas particuliers déjà mentionnés, à savoir le système isotherme et le système adiabatique.

- **Système isotherme**

Dans ce cas on a :  $T_e = T_s$ .

Il faut bien noter que dans tous les cas on a la même température  $T_s$  en tout point du volume  $V$  du réacteur.

- **Système adiabatique**

Ce cas correspond, comme pour les autres types de réacteurs, à une valeur nulle du troisième terme de l'équation (II.6), soit :

$$qV = 0$$

L'équation (II.6) peut alors s'écrire :

$$\Sigma F_{i0} C_{pi} (T_e - T_s) = \Sigma \Delta H_j \xi'_j \quad (II.8)$$

La température  $T_s$  de fonctionnement adiabatique est dans ce cas obtenue par la solution simultanée des équations (II.3) et de (II.8). On retrouve l'expression générale de la différence de température adiabatique:

$$T_e - T_s = \frac{\Sigma \Delta H_j \xi'_j}{\Sigma F_{i0} C_{pi}} \quad (II.9)$$

Lors de la résolution des équations (II.3) le terme  $r_j$  devra être explicité et apparaîtront de ce fait les concentrations  $C_i$  des diverses espèces chimiques à l'intérieur du réacteur. Si on appelle  $Q_s$  le débit volumétrique du soutirage, on écrira :

$$C_{is} = \frac{(F_i)_s}{Q_s} \quad (II.10)$$

Dans l'alimentation du réacteur on pourra, si nécessaire, explicité de la même manière les diverses concentrations  $C_{i0}$  :

$$C_{i0} = \frac{F_{i0}}{Q_e} \quad (II.11)$$

Dans beaucoup de cas on pourra prendre :  $Q_s = Q_e = Q$



## II.4. LE REACTEUR ÉTAGÉ

On réalise parfois une association en série de plusieurs réacteurs parfaitement agités; on constitue ainsi ce que l'on appelle un réacteur étagé. L'évolution des concentrations des divers réactifs et produits se fait alors par paliers successifs, ce qui permet de se rapprocher de l'évolution des concentrations enregistrée dans un réacteur tubulaire [2]. Chaque étage de la cascade sera traité comme un réacteur parfaitement agité. Les grandeurs de sortie d'un étage (m-1) seront prises comme grandeur d'entrée de l'étage m.

Pour un étage m, on obtient l'équation suivante [2]:

$$(F_1)_m = \frac{(F_1)_{m-1}}{1 - v_1 k_m \left(\frac{V_m}{Q}\right)} \quad (\text{II.12})$$

Si tous les étages ont des volumes  $V_m$  égaux et s'ils opèrent tous à la même température, l'équation ci-dessus s'écrira :

$$(F_1)_m = \frac{(F_1)_{m-1}}{1 - v_1 k_m \left(\frac{V_m}{Q}\right)} = \frac{(F_1)_{m-1}}{1 - v_1 k \theta}$$

Par récurrence on obtiendra une solution générale :

$$(F_1)_m = \frac{F_{10}}{(1 - v_1 k \theta)^m} \quad (\text{II.13})$$

Dans le cas générale, on réécrit les bilans molaires et enthalpiques similaires à (II.1) et (II.2) et relatifs à chaque étage, soit :

$$(F_i)_{m-1} - (F_i)_m + (\mathcal{R}_i)_m V_m = 0 \quad (\text{II.14})$$

$$(\Sigma F_i h_i)_{m-1} - (\Sigma F_i h_i)_m + q_m V_m = 0 \quad (\text{II.15})$$

L'indice i varie de 1 à k (nombre total de composés) et l'indice m de 1 à N (nombre total d'étages). Très souvent pour des raisons d'économie de construction, les volumes des étages seront choisis identiques  $V_m = V$ . Dans le cas où les températures de fonctionnement des divers étages seront choisies identiques et fixées a priori, seules les équations (II.14) seront à résoudre simultanément.

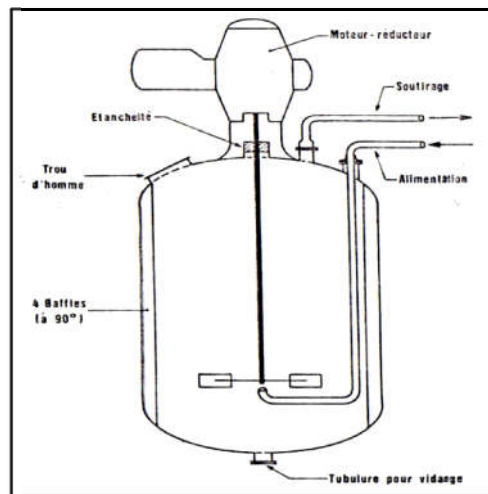
## II.5. DIVERSES TECHNOLOGIES UTILISABLES

Tel que schématisé sur la figure II.1, le réacteur parfaitement agité (RAC) ressemble fortement aux réacteurs discontinus. Dans la mesure où des tubulures pour l'alimentation et le soutirage sont spécifiées. On retrouvera ainsi des cuves agitées, soit au moyen d'un agitateur rotatif, soit au moyen d'une circulation externe [2].

### II.5.1. Cuve agitée mécaniquement

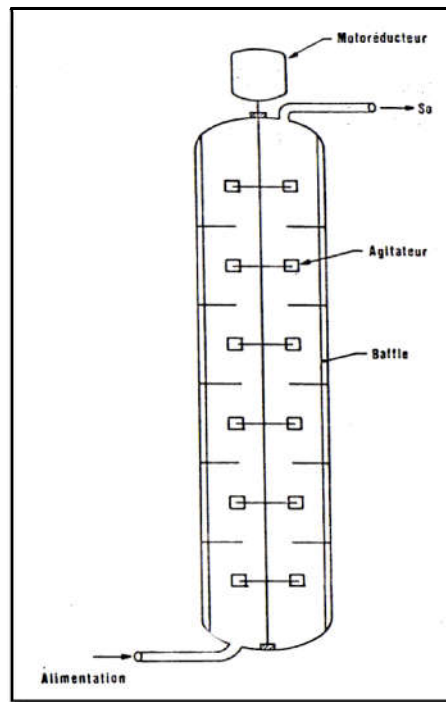
La figure II.3 schématise ce type d'appareil. La cuve cylindrique à fond généralement elliptique sera munie d'un agitateur rotatif dont l'axe moteur vertical sera généralement introduit par le sommet, quoiqu'une introduction par la partie inférieure soit parfois réalisée. Cette cuve pourra également être pourvue de surfaces d'échange thermique : double enveloppe, serpentin, plaques immergées, etc [2]. Il faut noter que les agitateurs rotatifs sont essentiellement utilisés pour des phases liquides. Le choix du type d'agitateur dépendra avant tout de la viscosité de la phase liquide présente dans le réacteur [2].

L'introduction de l'alimentation devra se faire de telle sorte que le mélange s'opère le plus rapidement possible ; la tubulure d'alimentation débouchera donc le plus souvent tout près du mobile d'agitation, en un point où le débit de circulation résultant de l'agitation est le plus élevé possible. La tubulure de soutirage peut en principe être localisée en tout point du réacteur, néanmoins on aura intérêt à la placer le plus loin possible de celle d'alimentation de manière à éviter toute possibilité de court-circuit entre entrée et sortie. La tubulure de soutirage sera souvent localisée en partie haute du réacteur [2].



**FIG.II.2.** schéma de réacteur continu parfaitement agité du type cuve à agitation mécanique [2]

Le système d'agitation sera conçu pour obtenir une qualité du mélange en rapport avec l'objectif visé. La réalisation de systèmes étagés pourra se faire en plaçant plusieurs mobiles d'agitation sur un même arbre monté au centre d'une colonne compartimentée (FIG.II.3). On pourra ainsi obtenir facilement jusqu'à une dizaine en série [2].



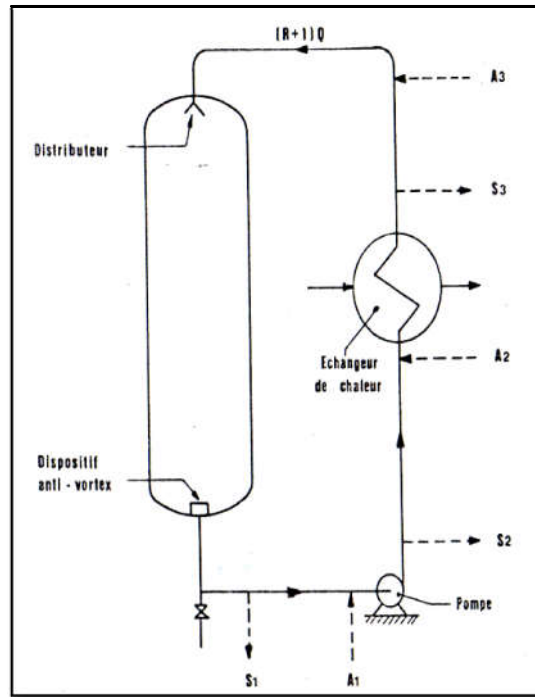
**FIG.II.3.** Schéma d'un réacteur étagé à agitation mécanique  
(6 étage en série) [2]

### II.5.2. Cuve munie d'une circulation externe

Comme dans le cas d'un réacteur discontinu, le mélange des réactifs et du milieu réactionnel peut être réalisé au moyen d'une circulation externe réalisée à l'aide d'une pompe (FIG.II.4). L'échange de chaleur sera réalisé, si nécessaire, en insérant dans la boucle de circulation un échangeur de type classique, tubulaire ou à plaques suivant les nécessités [2].

L'introduction des réactifs sera faite soit juste avant l'échangeur, soit juste après, de manière à utiliser au mieux la surface d'échange. Pour effectuer ce choix il faudra considérer à la fois la température de l'alimentation comparée à la température moyenne dans l'échangeur et le sens de l'effet thermique de la réaction (endothermique ou exothermique). Dans certains cas on pourra introduire les réactifs frais en aval de la pompe de manière à profiter de la plus faible pression à cet endroit pour les aspirer [2].

Dans tout les cas le soutirage devra être réalisé sur la boucle de circulation en un point légèrement en aval, de manière à ne pas créer de court-circuit entre alimentation et soutirage (point A et S portant un même indice dans la figure II.4).



**FIG.II.4.** Schéma de réacteur continu parfaitement agité à boucle de circulation (A<sub>1</sub>, A<sub>2</sub>, A<sub>3</sub> trois possibilités d'alimentation en réactif.

S<sub>1</sub>, S<sub>2</sub>, S<sub>3</sub> trois possibilités de soutirage du milieu réactionnel.

Q : débit d'alimentation) [2]

# 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 un réacteur continu agité isotherme à phase réactionnel gazeuse couplé à une réservoir de stockage du produit formé et dans lequel règne une phase gazeuse ayant une pression  $P_D$ . Le courant d'alimentation à l'état gazeux entre dans le réacteur avec un débit volumique  $F_0$ , une masse volumique  $\rho_0$  et une concentration en réactif clé  $C_{A_0}$ .

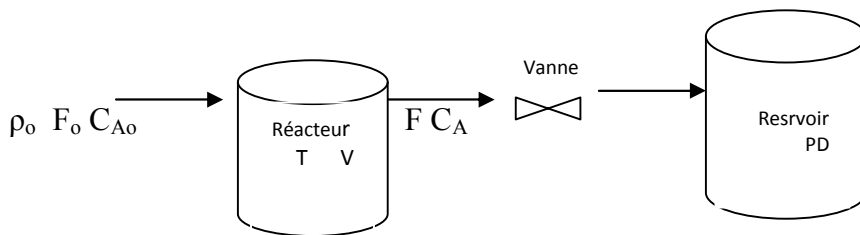


Figure III .1 Schéma simplifié du procédé étudié (Réacteur, Vanne, Réservoir)

### III.3. MODELE MATHEMATIQUES DU PROCÉDÉ ET METHODES DE RESOLUTION

Le modèle mathématique du procédé se résume essentiellement aux équations différentielles couplées suivantes :

$$F_0 \cdot \rho_0 - F \cdot \rho = V d(\rho) / dt \quad (\text{bilan de matière global})$$

$$F_0 \cdot C_{A_0} - F \cdot C_A - k_1 C_A V + k_2 C_B V = V d(C_A) / dt \quad (\text{bilan de matière du réactif A})$$

$$- F \cdot C_B - k_1 C_A V + k_2 C_B V = V d(C_B) / dt \quad (\text{bilan de matière du produit B})$$

avec

$C_A$  : concentration molaire du réactif A dans le réacteur (mole/l)

$C_{A_0}$  : concentration molaire du réactif A à l'entrée du réacteur (mole/l)

$C_B$  : concentration molaire du produit B dans le réacteur (mole/l)

$F_o$  : débit volumique total du gaz à l'entrée du réacteur (l/s)

$F$  : débit molaire total du gaz à la sortie du réacteur (l/s)

$V$  : volume du réacteur (l)

$\rho_o$  : masse volumique du gaz à l'entrée du réacteur (kg/l)

$\rho$  : masse volumique du gaz à la sortie du réacteur (kg/l)

$k_1, k_2$  : constante cinétiques des réactions directe et indirecte ( $A \rightleftharpoons B$ )

La résolution simultanée des trois équations différentielles (bilans) formant le modèle mathématique du procédé par la méthode de Runge-Kutta d'ordre 4 (sous programme odeset en Matlab) permet d'obtenir le taux de conversion du réactif A à la sortie du réacteur,  $X_A$ , en fonction de divers paramètres opératoires. Ces paramètres opératoires sont :

- coefficient de débit de la vanne  $C_v$  ;
- la température régnante dans le réacteur  $T$  ;
- le volume du réacteur  $V$  ;
- le débit volumique total du gaz à l'entrée du réacteur  $F_o$  ;
- la pression du gaz à l'entrée du réacteur  $P_o$  ;
- la pression régnante dans le réservoir de stockage du produit  $P_D$ .

### III.4. ALGORITHME UTILISÉ DANS LA SIMULATION

L'algorithme se résume par les étapes suivantes :

**Étape I** : initialisation des paramètres

```

cv = 25      (coefficient de la vanne)
PD = 10    (pression régnante dans le reservoir en atm)
mwa = 50    (mase molaire du réactif A en g/mole)
mwb = 50    (mase molaire du produit B en g/mole)
r = 0.082   (constante des gaz parfaits en litre atmm/mole.K)
T = 350     (temperature régnante dans le réacteur en °K)
Po = 40    (pression du gaz à l'entrée du réacteur en atm )
Fo = 10    (débit volumique du gaz à l'entrée du réacteur en litre/s)
k1 = 0.5   (constant cinétique de la réaction directe en 1/s)
k2 = 0.05  (constant cinétique de la réaction indirecte en 1/s)
v = 1000    (volume du réacteur en litre)
tf = 750    (temps final de simulation en secondes)

```

**Étape II** : calcul des différentes grandeurs physiques en utilisant le logiciel Matlab [Tec de l'ing F3600]

```

Si t <= tf faire
    rowo = (po*mwa)/(r*t)
    cao = rowo/mwa
    options = odeset('RelTol',1e-6,'AbsTol',[1e-6 1e-6] )
    [t,var]=ode45('CSTR_Gas',[0 tf],[rowo cao],options)
    row = var(:,1)
    p=row.*r.*t./mwa
    f=cv*sqrt((p-pd)./row)
    y=ca.*r.*t./p
    CA= var(:,2)
    XAs = (CAo- CA) / CAo
    CB=(p./(r.*t)).*(1-y)
Fin Si

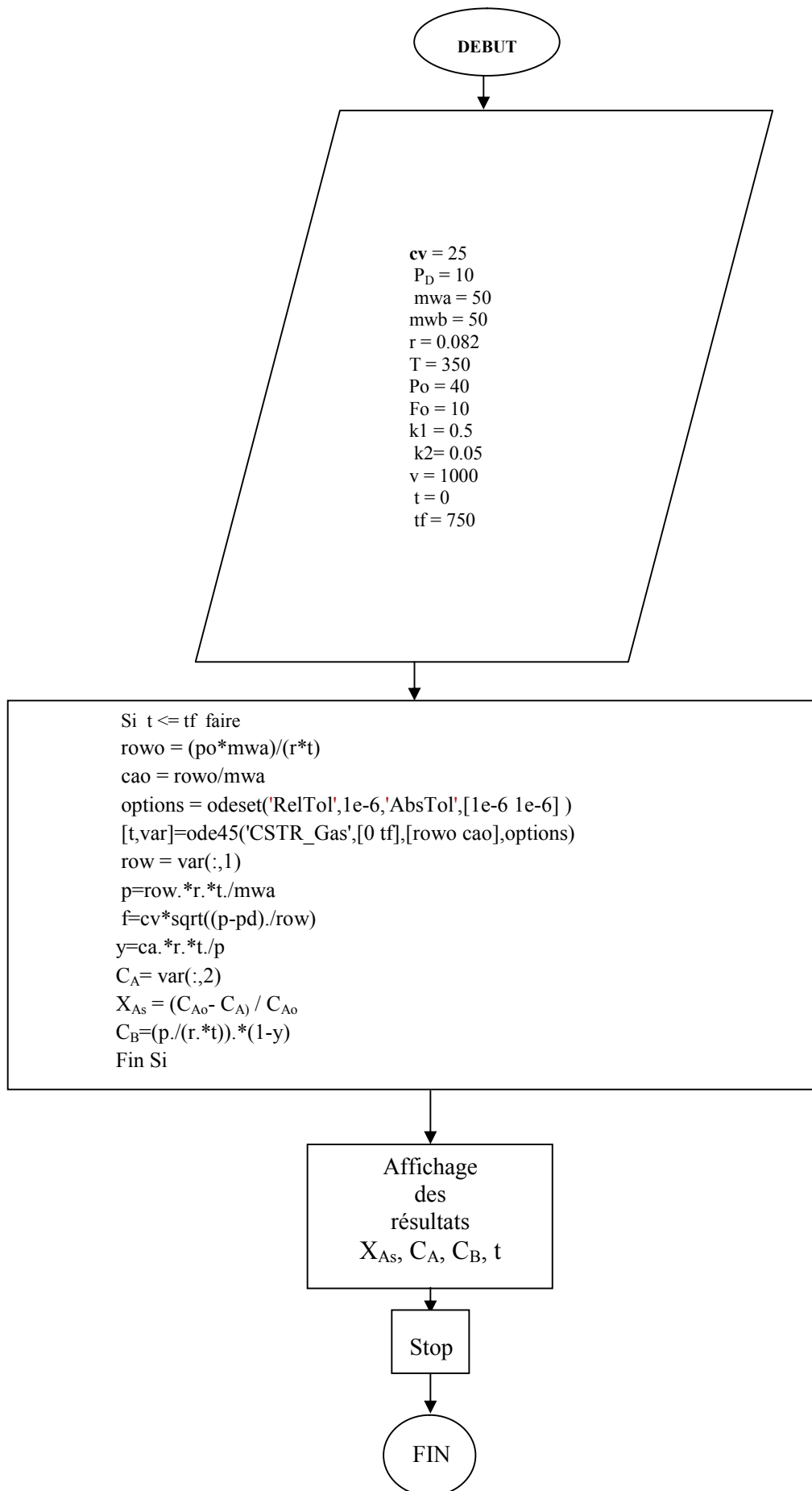
```

**Étape III**

Affichage des résultats trouvés : X<sub>As</sub>, C<sub>A</sub>, C<sub>B</sub>, t (temps)



## III.5. ORGANIGRAMME GENERAL UTILISÉ DANS LA SIMULATION



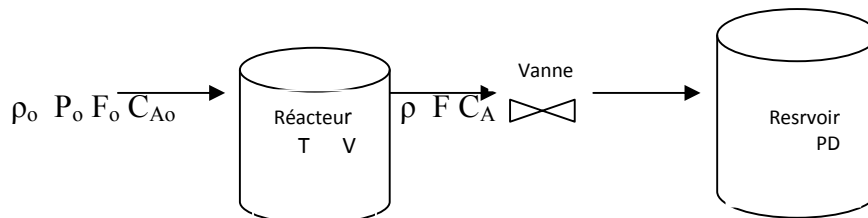
# Chapitre IV

**RESULTATS ET DISCUSSION**

**IV.1. Introduction**

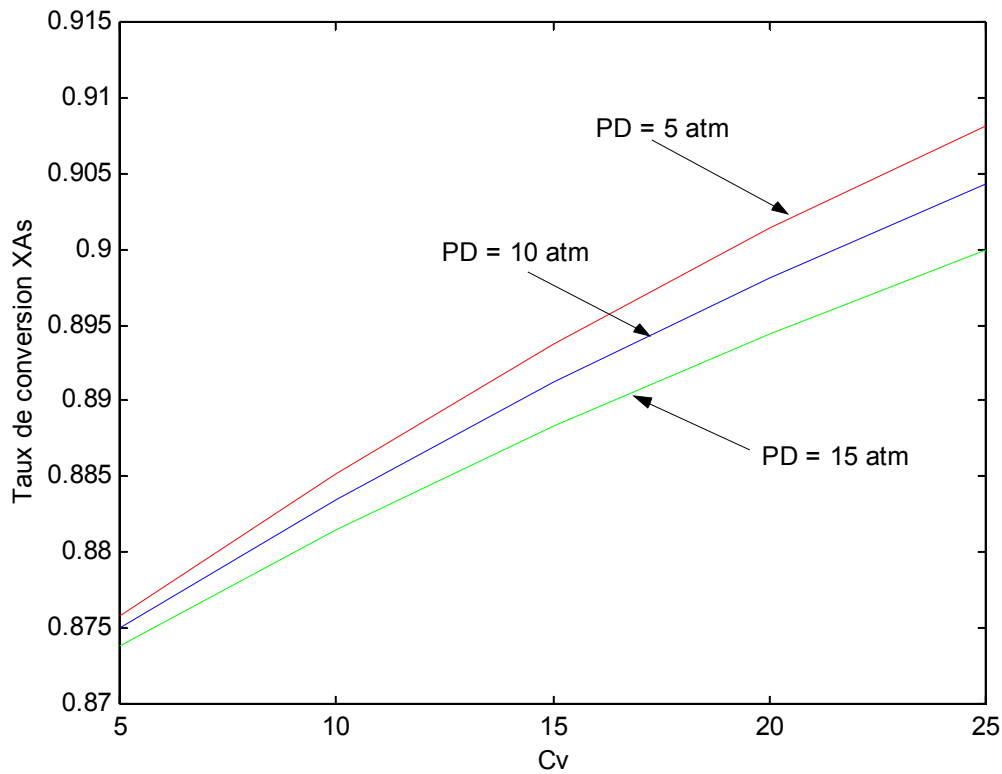
Dans ce chapitre, on va visualiser geaphiquement, par simulation au moyen du logiciel Matlab, comment varie le taux de conversion du réactif clé A ( $X_{As}$ ) en fonction du coefficient caractéristique de la vanne ( $C_v$ ), c'est-à-dire du type de vanne utilisée et cela pour différentes paramètres opératoires. Les types de vannes considérées dans cette étude sont caractérisés essentiellement par la valeur du coefficient  $C_v$ . Les principaux paramètres opératoires pris en considération dans cette étude et visualisés au niveau de la figure IV .1 sont :

- le coefficient de débit de la vanne  $C_v$  ;
- la temperature de la phase gaz régnante dans le réacteur  $T$  ;
- la pression ( $P_D$ ) régnante dans le réservoir de stockage du produit formé situé en aval (après) le réacteur ;
- le volume du réacteur  $V$ ;
- le débit volumique à l'entrée du réacteur  $F_o$  ;
- La pression  $P_o$  du gaz à l'entrée du réacteur  $P_o$ .



**Figure IV.1** Schéma simplifié du procédé étudié (Réacteur, Vanne, Réservoir)

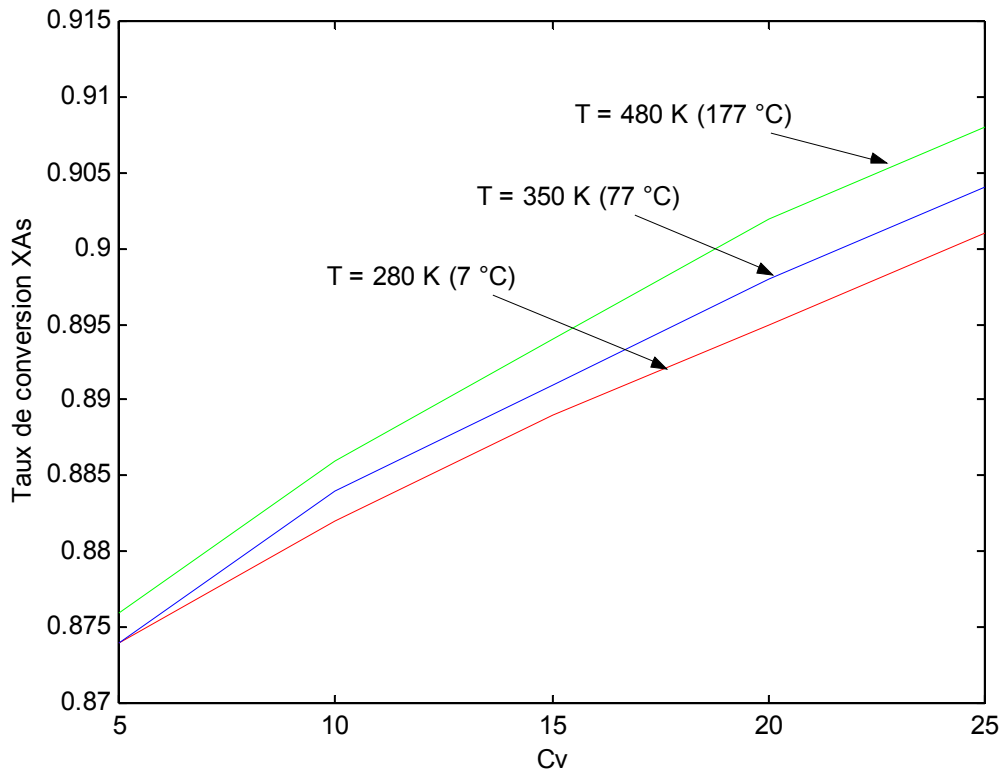
**IV.2. Taux de conversion XAs en fonction du coefficient de la vanne Cv pour différentes valeurs de la pression PD régnante dans le réservoir de stockage du produit**



**Figure IV.2.** Taux de conversion XAs en fonction du coefficient de la vanne Cv pour différentes valeurs de la pression PD régnante dans le réservoir de stockage du produit.

La figure IV.2 montre que quelque soit la valeur donnée du coefficient de la vanne Cv, c'est-à-dire quelque soit le type de vanne, le taux de conversion augmente si la pression dans le réservoir (PD) diminue. Cet effet devient plus important à fur et à mesure que la valeur de Cv augmente. Donc si on désire augmenter le taux de conversion du réactif clé A, il faudrait diminuer la pression qui règne dans le réservoir.

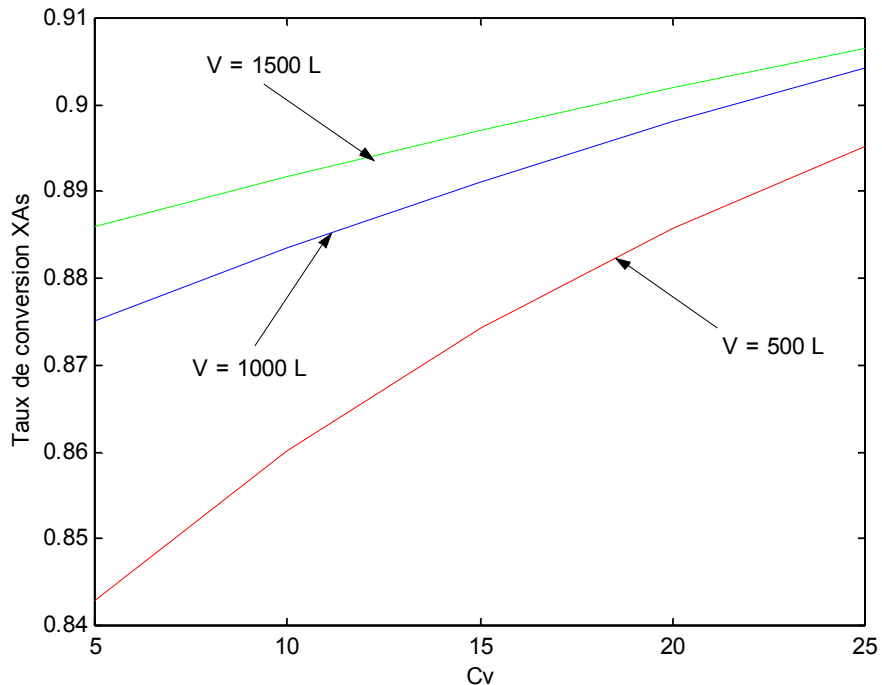
**IV.3. Taux de conversion  $X_{As}$  en fonction du coefficient de la vanne  $C_v$  pour différentes valeurs de la temperature  $T$  régnante dans le réacteur**



**Figure IV.3.** Taux de conversion  $X_{As}$  en fonction du coefficient de la vanne  $C_v$  pour différentes valeurs de la temperature  $T$  régnante dans le réservoir de stockage du produit

La figure IV.3 montre que quelque soit la valeur donnée du coefficient de la vanne  $C_v$ , le taux de conversion augmente si la temperature dans le réacteur augmente. Cet effet devient plus important à fur et à mesure que la valeur de  $C_v$  augmente. Donc, si on désire augmenter le taux de conversion du réactif clé A, il faudrait augmenter la temperature régnante dans le réacteur.

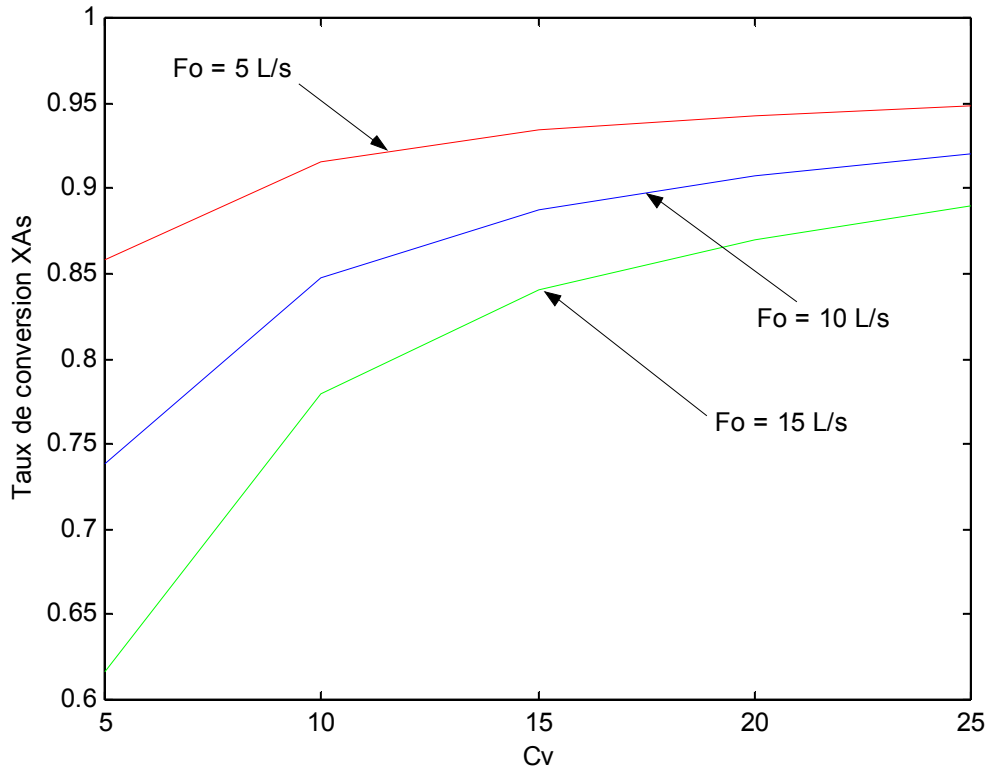
**IV.4. Taux de conversion  $X_{As}$  en fonction du coefficient de la vanne  $C_v$  pour différentes valeurs du volume  $V$  du réacteur**



**Figure IV.4.** Taux de conversion  $X_{As}$  en fonction du coefficient de la vanne  $C_v$  pour différentes valeurs du volume  $V$  du réacteur.

La figure IV.4 montre que quelque soit la valeur donnée du coefficient de la vanne  $C_v$ , le taux de conversion augmente si le volume du réacteur augmente. Cet effet devient plus important à fur et à mesure que la valeur de  $C_v$  augmente. Donc, si on désire augmenter le taux de conversion du réactif clé A, il faudrait augmenter le volume du réacteur. Cette figure montre aussi que pour un volume donné du réacteur ( $V$  constant), les vannes ayant un  $C_v$  élevé permettent d’obtenir des taux de conversion élevés.

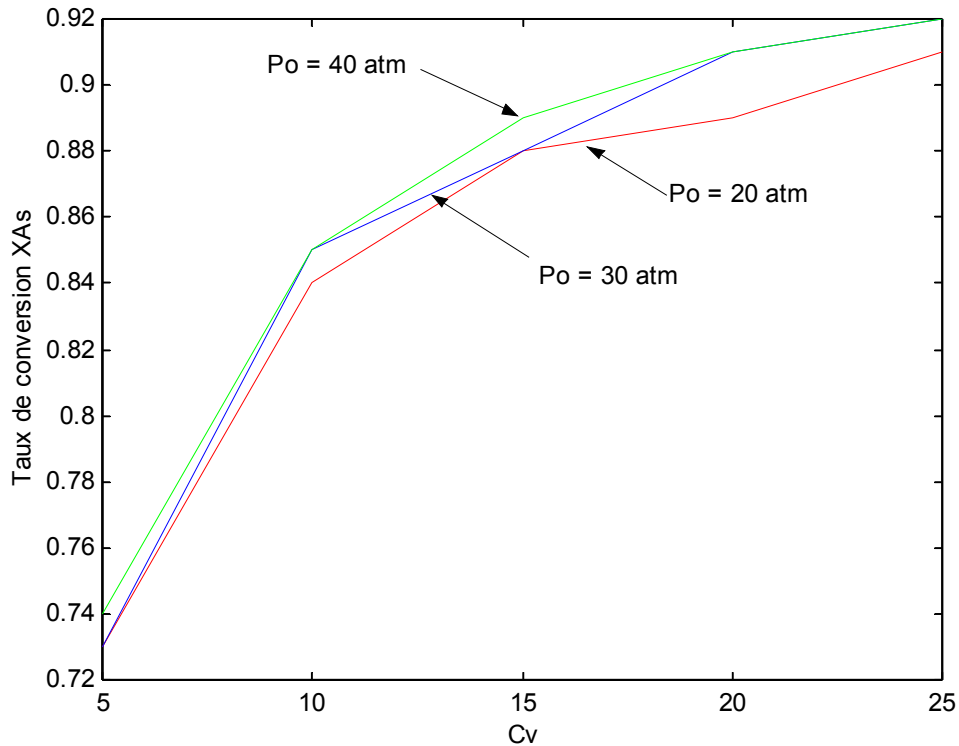
**IV.5. Taux de conversion  $X_{As}$  en fonction du coefficient de la vanne  $C_v$  pour différentes valeurs du débit volumique  $F_o$  à l'entrée du réacteur**



**Figure IV.5** Taux de conversion  $X_{As}$  en fonction du coefficient de la vanne  $C_v$  pour différentes valeurs du débit volumique  $F_o$  à l'entrée du réacteur  $F_o$ .

La figure IV.5 montre que quelque soit la valeur donnée du coefficient de la vanne  $C_v$ , le taux de conversion augmente si le débit volumique  $F_o$  à l'entrée du réacteur diminue. Donc, si on désire augmenter le taux de conversion du réactif clé A, il faudrait diminuer le débit volumique  $F_o$  à l'entrée du réacteur. Cette figure montre aussi que pour un débit volumique  $F_o$  donné ( $F_o$  constant), les vannes ayant un  $C_v$  élevé permettent d'obtenir des taux de conversion élevés.

**IV.6. Taux de conversion  $X_{As}$  en fonction du coefficient de la vanne  $C_v$  pour différentes valeurs de la pression  $P_o$  à l'entrée du réacteur**



**Figure IV.6.** Taux de conversion  $X_{As}$  en fonction du coefficient de la vanne  $C_v$  pour différentes valeurs de la pression  $P_o$  à l'entrée du réacteur  $F_o$ .

La figure IV.6 montre que quelque soit la valeur donnée du coefficient de la vanne  $C_v$ , le taux de conversion augmente si la pression  $P_o$  à l'entrée du réacteur augmente. Donc, si on désire augmenter le taux de conversion du réactif clé A, il faudrait augmenter la pression  $P_o$  à l'entrée du réacteur. Cette figure montre aussi que pour une pression donnée ( $P_o$  constant), les vannes ayant un  $C_v$  élevé permettent d'obtenir des taux de conversion élevés. En effet, une vanne ayant un  $C_v$  égale à 5 donne une conversion égale à 73 %, alors qu'une vanne ayant un  $C_v$  égal à 25 permet d'obtenir une conversion proche de 92 %.



# **CONCLUSION GENERALE**

## CONCLUSION GENERALE

---

### CONCLUSION GENERALE

Dans ce travail on a utilisé un logiciel de simulation (Matlab) pour simuler le fonctionnement d'un réacteur continu à phase gaz couplé, au moyen d'une vanne, à un réservoir de stockage du produit formé. Le cas que nous avons simulé correspond à une situation dans laquelle il faut déterminer, par simulation, dans quels cas le taux de conversion à la sortie du réacteur serait maximal en faisant varier les valeurs de plusieurs paramètres opératoires, à savoir :

- coefficient de débit de la vanne  $C_v$  ;
- la température régnante dans le réacteur  $T$  ;
- le volume du réacteur  $V$  ;
- le débit volumique total du gaz à l'entrée du réacteur  $F_o$  ;
- la pression du gaz à l'entrée du réacteur  $P_o$  ;
- la pression régnante dans le réservoir de stockage du produit  $P_D$ .

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

- quelque soit la valeur du coefficient de la vanne  $C_v$ , le taux de conversion augmente si la pression dans le réservoir ( $P_D$ ) diminue ;
- quelque soit la valeur donnée du coefficient de la vanne  $C_v$ , le taux de conversion augmente si la température ( $T$ ) dans le réacteur augmente ;
- quelque soit la valeur donnée du coefficient de la vanne  $C_v$ , le taux de conversion augmente si le volume ( $V$ ) du réacteur augmente ;
- quelque soit la valeur donnée du coefficient de la vanne  $C_v$ , le taux de conversion augmente si le débit volumique ( $F_o$ ) à l'entrée du réacteur diminue ;
- quelque soit la valeur donnée du coefficient de la vanne  $C_v$ , le taux de conversion augmente si la pression ( $P_o$ ) à l'entrée du réacteur augmente.

# RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

### RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

1. [1] J. VILLERMAUX, *Génie de la réaction chimique conception et fonctionnement des réacteurs*, Paris, 2<sup>me</sup> édition, 1993, p 71.
2. [2] PIEERE TRAMBOUZE, *les réacteurs chimiques (conception / calcul / mise en œuvre)*, IFP, 1984, p 36.
3. [3] E. KOLLER, *Aide-Mémoire Génie Chimique*, Paris, Dunod, 3<sup>ème</sup> édition, 2009, p 546.
4. [4] D.RONZE, *Introduction au génie des procédés*. Tec & Doc, Paris, 2008, p 286.
5. [5] L.JIMMY, H.UMPHREY, E.GEORGE, KELER II, *Procédés de séparation techniques, sélection dimensionnement*, Dunod, Paris, 2001.
6. [6] P.BACHMAN, P.TISOT, *Précise de génie chimique*. Librairie de l'université George et Cie. S.A. Genève, 1981.
7. [7] J.LIETO, *Le génie chimique a l'usage des chimistes*, Tec & Doc Lavoisier, Paris, 1998.
8. [8] P.WUITHIER, *Le pétrole, raffinage et génie chimique*. IFP. 2<sup>ème</sup> Editions, TOME 1, Paris 1972, p.545.
9. [9] Kamal I. M. Al-Malah, *MATLAB Numerical Methods with Chemical Engineering Applications* McGraw-Hill Education. 2014, p 310.
10. [10] WILLIAM.LUYBEN, *Process modeling simulation and control for chemical engineers*, second Edition, Mc Graw-hill Edition, Singapore, 1996.