

République Algérienne Démocratique et Populaire  
Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique  
Université a. Mira de Bejaia



Faculté de Technologie  
Département de Génie Des Procédés

# Mémoire

## EN VUE DE L'OBTENTION DU DIPLOME DE MASTER

Domaine : Science et Technologie Filière : Génie des Procédés  
Spécialité : Génie Chimique

Présenté par

**AKIF RAFIK**

**ALKAMA NASSIM**

*Thème*

**SIMULATION D'UN RÉACTEUR PARFAITEMENT AGITÉ CONTINU NON  
ISOTHERME : CAS D'UNE RÉACTION COMPLEXE**

Soutenu le 13/07/2022

Devant le jury composé de :

Nom et Prénom	Grade		
M. DIB ABDELHAFID	PR	Université de Bejaïa	Président
Mme. BOUADEM NASSIMA	MCB	Université de Bejaïa	Examinatrice
M. LEMOUARI MESSAOUD	MCA	Université de Bejaïa	Encadrant

Année Universitaire : 2021/2022

## **Remerciements**

*Tout d'abord, nous tenons à remercier « dieu » de nous avoir donné la force et le courage de mener à bien ce modeste travail.*

*Nous exprimons notre profonde gratitude à nos chers parents pour leurs compréhensions, leurs encouragements et leurs soutiens sans failles.*

*Nous tenons à remercier **Monsieur M. LEMOUARI** notre promoteur pour sa patience et sa coopération le long de cette période*

*Nous tenons particulièrement à remercier vivement :*

***Monsieur A. DIB et Madame N. BOUADEM** pour avoir accepté d'examiner notre travail*

*Enfin, nous tenons à remercier toutes personnes qui ont donné leurs aides de près ou de loin, directement ou indirectement pour la réussite de ce travail.*

## *Dédicaces*

*Je dédie ce modeste travail à :*

*Mes très chers parents.*

*Ma sœur, mon frère,*

*Mes amis et meilleurs amis.*

*Toute ceux qui ont été présent pour moi de  
près ou de loin.*

*Tous mes amis.*

*Rafik*

## *Dédicaces*

*Je dédie ce modeste travail à :*

*Mes chers parents.*

*Ma sœur, mes frères,*

*Nièce et neveux.*

*Toute ma famille de près ou de loin.*

*Tous mes amis.*

*Nassim*

# SOMMAIRE

# SOMMAIRE

NOMENCLATURE

LISTE DES TABLEAUX

ABREVIATIONS

INTRODUCTION GENERALE.....1

## CHAPITRE 1

### ÉTUDE BIBLIOGRAPHIQUE SUR LES RÉACTEURS CHIMIQUES

<b>1.1 Introduction</b> .....	3
<b>1.2 Généralités sur les réacteurs</b> .....	3
1.2.1 Définition d'un réacteur chimique.....	3
1.2.2 Classification des réacteurs.....	4
1.2.2.1 Selon la nature des phases en présence.....	5
1.2.2.2 Selon le mode de fonctionnement.....	5
1.2.2.3 Classification des réacteurs du point de vue thermique.....	6
1.2.2.4 Classification selon le régime d'écoulement.....	7
1.2.2.5 Circulation des phases.....	8
1.2.3 Type de réacteurs chimique idéaux.....	8
1.2.3.1 Réacteur parfaitement agité continu.....	9
1.2.3.2 Réacteur parfaitement agité fermé.....	10
1.2.3.3 Réacteur tubulaire à écoulement piston .....	10
1.2.3.4 Réacteur catalytique (poly phasiques) .....	11
<b>1.3 Généralité sur la réaction chimique</b> .....	11
1.3.1 Cinétique chimique.....	12
1.3.1.1 Vitesse de réaction.....	12
1.3.1.2 Facteurs cinétiques.....	12
<b>1.4 Les réactions complexes</b> .....	13
<b>1.5 Equations de bilans dans les systèmes ouverts</b> .....	14
1.5.1 Bilan molaire.....	14
1.5.2 Bilan énergétique.....	14
<b>1.6 Conclusion</b> .....	15

---

## CHAPITRE 2

### MODÈLE MATHÉMATIQUE DU RÉACTEUR

<b>2.1 Introduction</b> .....	16
<b>2.2 Modèles mathématiques</b> .....	16
2.2.1 Modèle mathématique en régime dynamique.....	18
2.2.1.1 Bilan molaire.....	18
2.2.1.2 Bilan énergétique.....	19
2.2.2 Modèle mathématique en régime stationnaire.....	19
<b>2.3 Résolution numérique du modèle mathématique</b> .....	21
<b>2.4 Conclusion</b> .....	21

---

## CHAPITRE 3

### RÉSULTATS ET DISCUSSIONS

<b>3.1 Introduction</b> .....	22
<b>3.2 Simulation en régime stationnaire</b> .....	22
<b>3.3 Simulation en régime dynamique</b> .....	24
3.3.1 Evolution des concentration des réactifs.....	24
3.3.2 Evolution des concentration des produits.....	25
3.3.3 Evolution de la température du réacteur.....	26
3.3.4 Effet de la variation du débit d'alimentation.....	27
3.3.5 Effet des conditions initiales.....	30
3.3.5.1 Effet de la concentration initiale du réactif A .....	30
3.3.5.2 Effet de la concentration initiale du réactif B.....	33
3.3.5.3 Effet de la température initiale sur la température du réacteur.....	36
<b>3.4 Conclusion</b> .....	36
<b>CONCLUSION GENERALE</b> .....	39

### ANNEXES

## NOMENCLATURE

Symbole	Désignation	Unité
$C_A$	Concentration du constituant A	$\text{mol/m}^3$
$C_B$	Concentration du constituant B	$\text{mol/m}^3$
$C_C$	Concentration du constituant C	$\text{mol/m}^3$
$C_D$	Concentration du constituant D	$\text{mol/m}^3$
$C_E$	Concentration du constituant E	$\text{mol/m}^3$
$C_{A0}$	Concentration initial du constituant A	$\text{mol/m}^3$
$C_{B0}$	Concentration initial du constituant B	$\text{mol/m}^3$
$C_{C0}$	Concentration initial du constituant C	$\text{mol/m}^3$
$C_{D0}$	Concentration initial du constituant D	$\text{mol/m}^3$
$C_{E0}$	Concentration initial du constituant E	$\text{mol/m}^3$
$C_{PA}$	Capacité calorifique spécifique du constituant A	$\text{J/k.mol}$
$C_{PB}$	Capacité calorifique spécifique du constituant B	$\text{J/k.mol}$
$C_{PC}$	Capacité calorifique spécifique du constituant C	$\text{J/k.mol}$
$C_{PD}$	Capacité calorifique spécifique du constituant D	$\text{J/k.mol}$
$C_{PE}$	Capacité calorifique spécifique du constituant E	$\text{J/k.mol}$
$k_1$	Constante de vitesse de la réaction 1	$\text{m}^3/\text{mol.min}$
$k_2$	Constante de vitesse de la réaction 2	$\text{m}^3/\text{mol.min}$
$k_3$	Constante de vitesse de la réaction 3	$\text{m}^3/\text{mol.min}$
$r_1$	Vitesse de la réaction 1	$\text{mol/m}^3.\text{min}$
$r_2$	Vitesse de la réaction 2	$\text{mol/m}^3.\text{min}$
$r_3$	Vitesse de la réaction 3	$\text{mol/m}^3.\text{min}$
$T$	Température du contenu du réacteur	K
$T_0$	Température du flux d'entrée	K
$T_J$	Température de l'enveloppe	K
$A$	Surface d'échange	$\text{m}^2$
$U$	Coefficient de transfert de chaleur	$\text{W/m}^2.\text{K}$
$V$	Volume du réacteur	$\text{m}^3$
$f$	Débit d'alimentation	$\text{m}^3/\text{min}$



## **LISTE DES TABLEAUX**

**Tableau 2.1** : Données utilisée pour la simulation du réacteur.

**Tableau 3.1** : Valeurs en régime stationnaire des variables du réacteur.

## **ABREVIATIONS**

**CSTR** : « Continuous Stirred-Tank Reactor » Réacteur Chimique non Isotherme à Cuve Parfaitement Agitée.

# **INTRODUCTION GÉNÉRALE**

## INTRODUCTION GÉNÉRALE

Dans les années passées la production dans l'industrie chimique à été basée principalement sur plusieurs expériences. Donc, pour éviter ces innombrables expériences et pour des raisons économiques, compte tenu du fait que très souvent, on travaille dans des conditions extrêmes de température et de pression, des fois des produits nocifs. L'utilisation des méthodes de modélisation, à travers des modèles mathématiques, permettant de prédire les relations existant entre la modification des paramètres expérimentaux ou de production et les résultats observés dans la pratique, est devenue plus que nécessaire [1].

On peut dire que le réacteur chimique est le cœur des procédés chimiques. En effet le réacteur chimique a un rôle incontournable dans l'industrie chimique. Il existe plusieurs types de réacteur et parmi eux on trouve le réacteur agité continu.

Pour satisfaire les exigences de la clientèle, l'industrie en génie des procédés est obligée d'améliorer constamment ses procédés et installations industrielles pour perfectionner ainsi la productivité et la rentabilité des procédés de production. Parallèlement aux objectifs de production, la sûreté de fonctionnement des installations ; la protection de l'environnement et du personnel doivent être garanties.

Ainsi, pour faire face à cette problématique, on fait appel à la modélisation des réacteurs chimiques qui occupent une place très importante dans l'industrie chimique.

Dans ce contexte l'objectif de notre travail est de faire une étude par simulation, d'un réacteur parfaitement agité continu non isotherme dans lequel se déroule une réaction chimique complexe.

Afin de mener cette étude, le présent travail a été structuré de la manière suivante :

Nous commencerons, dans un premier temps, par une étude bibliographique sur les réacteurs chimiques dans laquelle seront présentées différents types de réacteurs, ainsi que les réactions complexes.

Dans le deuxième chapitre, nous aborderons la modélisation d'un réacteur chimique parfaitement agité continu non isotherme. A cet égard, le modèle mathématique du réacteur en régime stationnaire, et en régime dynamique sera présenté.

Le troisième chapitre sera consacré aux résultats et discussions.

Enfin nous terminerons ce travail par une conclusion générale résumant les principaux résultats et quelques perspectives.

# CHAPITRE 1

# CHAPITRE 1

## ÉTUDE BIBLIOGRAPHIQUE SUR LES RÉACTEURS CHIMIQUES

### 1.1 Introduction

Les réacteurs chimiques occupent une place centrale dans les entreprises du secteur de la chimie. Par la mise en présence de réactifs dans des conditions adaptées, ils permettent de combiner et de transformer par une ou plusieurs réactions chimiques les matières premières en produits utiles. Leur rôle prépondérant est à la hauteur des besoins énergétiques nécessaires pour permettre aux réactions d'avoir effectivement lieu et ce, de manière efficace. Les importantes consommations d'électricité, de chaleur et de froid qui en découlent, représentent naturellement un poids important sur la facture énergétique et l'impact environnemental de chaque entreprise du secteur [2].

Dans ce chapitre, nous aborderons sur l'étude bibliographique des réacteurs chimiques, on commence par la définition puis leurs classifications et leurs types. Enfin nous allons parler sur la cinétique chimique et sur les réactions complexes.

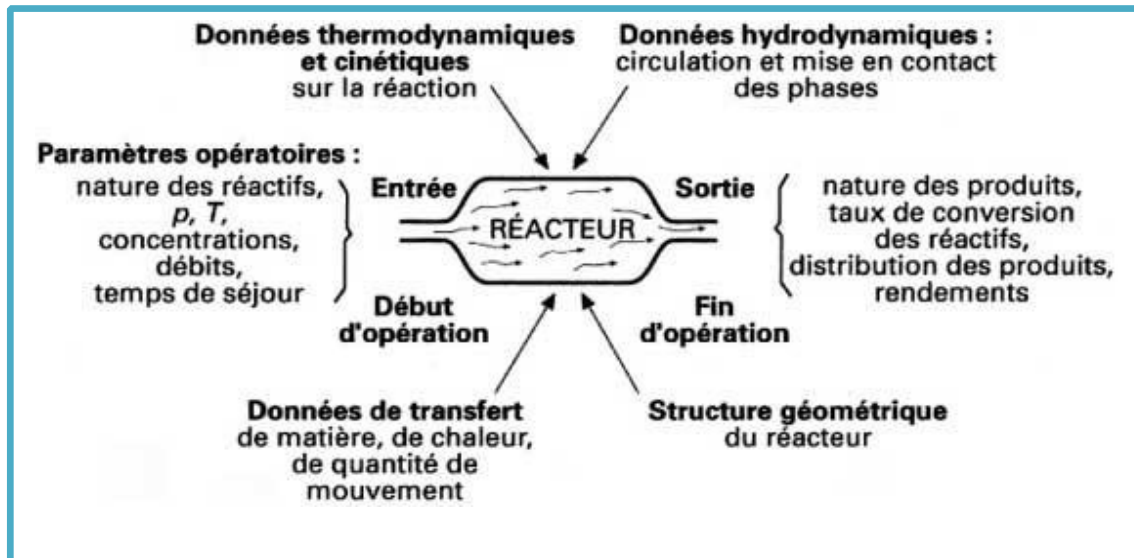
### 1.2 Généralités sur les réacteurs

Le réacteur chimique c'est l'équipement siège des réactions chimiques, il a un rôle très important et incontournable dans l'industrie chimique, le choix d'un réacteur chimique dépend essentiellement de la nature des réactifs et des produits et de type de la réaction elle-même [3].

#### 1.2.1 Définition d'un réacteur chimique

On appelle réacteur tout appareillage permettant de réaliser une réaction chimique ou biochimique, c'est-à-dire de transformer des espèces moléculaires en d'autres espèces moléculaires. Néanmoins, cette appellation est limitée aux cas où la transformation (ou conversion) est effectuée dans le but de produire une ou plusieurs espèces chimiques et déterminées ou d'éliminer d'un mélange un ou plusieurs composés.

La figure (1.1) indique schématiquement les principaux facteurs gouvernant le fonctionnement d'un réacteur. L'objet du génie de la réaction chimique est d'étudier les interactions entre ces facteurs [4].



**Figure 1.1** : Facteurs gouvernant le fonctionnement d'un réacteur chimique [4].

## 1.2.2 Classification des réacteurs

Les diverses usines réalisant des transformations chimiques utilisent une grande variété des réacteurs, qui diffèrent en forme et en dimension. En effet, on rencontre des fours, des chaudières, des bacs, des colonnes, des ballons, des mélangeurs, ou des simples tubes.

Tous ces appareils ont cependant en commun le fait que leur fonction est de réaliser une transformation chimique. Donc, en se référant aux caractéristiques principales d'une transformation chimique, et aux exigences pratiques de l'exploitation des processus chimiques, on devrait être capable de définir un certains nombres de critères qui serviraient de base à une classification [5].

### 1.2.2.1 Selon la nature des phases en présence

#### ➤ Systèmes monophasiques

Le milieu réactionnel est alors constitué par une phase gazeuse ou une phase liquide :

- Système gazeux (par exemple, chloration de l'éthylène, vapocraquage).
- Système liquide (par exemple, acétate d'éthyle à partir de  $\text{CH}_3\text{COOH} + \text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ ) [6].

#### ➤ Systèmes polyphasiques (ou hétérogènes)

On peut ainsi rencontrer les combinaisons suivantes :

- Mélange liquide-liquide (par exemple sulfonation, nitration des aromatiques).
- Système gaz-liquide (par exemple oxydation, hydrogénation, chloration d'un réactif organique en phase liquide).
- Système gaz-solide (par exemple combustion de charbon, grillage de pyrites).
- Système gaz-solide (catalyseur) (par exemple synthèse de  $\text{NH}_3$ ).
- Système gaz-liquide-solide (par exemple réaction Fischer-Tropsch liquéfaction du charbon, hydro sulfuration d'une coupe pétrolière) [6].

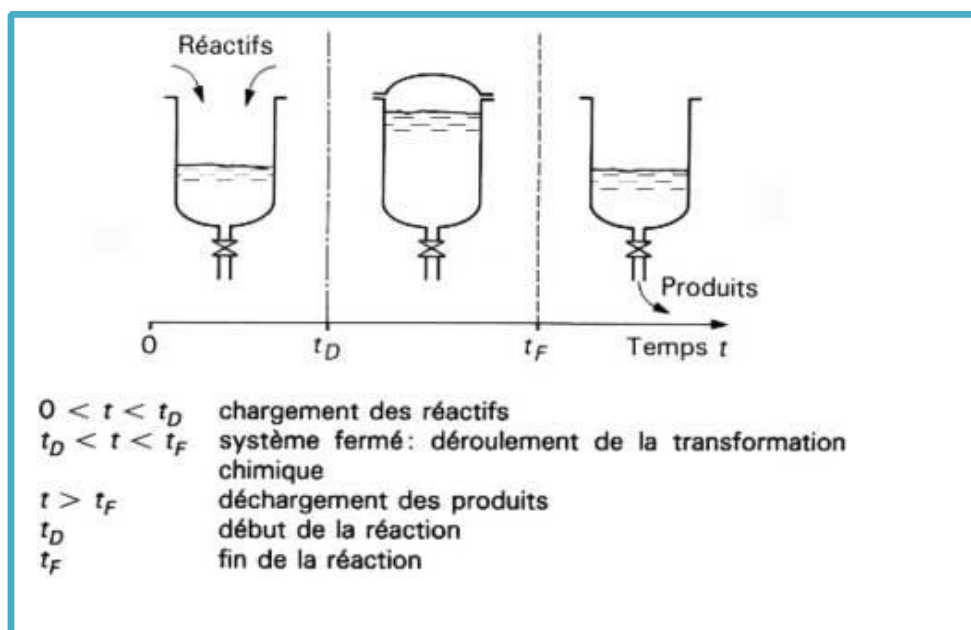
### 1.2.2.2 Selon le mode de fonctionnement

Un second critère pour notre classification sera en quelque sorte fixé par les exigences pratiques de l'exploitation du processus chimique. Ainsi, on a le choix entre un mode de fonctionnement discontinu et une opération réalisée en continu [6].

#### ➤ En discontinu

La figure (1.2) signifie charger le ou les réactifs dans le réacteur adéquat et laisser la transformation chimique se dérouler dans le temps. 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 [6].





**Figure 1.2** : Opération discontinue : différentes phases [2].

### ➤ En continu

Les appareils de 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.

Une variante du système discontinu est réalisée lorsqu'une partie des réactifs est introduite tout au long de l'opération, le déchargement des produits se faisant, là encore, à la fin de l'opération. On qualifie ce mode d'opération de **semi-continu**.

On trouve également des cas où les réactifs étant chargés au début de l'opération, certains produits de la réaction sont progressivement éliminés, tandis que la transformation se déroule [2].

#### 1.2.2.3 Classification des réacteurs du point de vue thermique

La classification des réacteurs du point de vue thermique est fondée sur ce qui se passe au sujet de la quantité de la chaleur au cours de la réaction. Lorsque cette quantité reste dans le mélange réagissant, nous disons que le réacteur est adiabatique. Si cette même quantité est

entièrement transmise au milieu environnant sans aucun changement de température des matières réagissant ( $T=C^{te}$ ), nous parlons d'un réacteur isotherme.

Dans tous les autres cas, la quantité de chaleur est répartie entre le milieu environnant et les substances participant à la réaction ; le réacteur occupe donc une place intermédiaire entre les deux cas extrêmes précédant, et nous le désignons par le terme réacteur poly trope. Soulignons que les réacteurs que nous rencontrons dans la pratique industrielle ne correspondent pas aux cas extrêmes précédents, c'est-à-dire qu'ils ne sont ni purement adiabatique ni isotherme, mais ils fonctionnent dans les domaines voisins des deux cas extrêmes.

- Domaine adiabatique. Température variable ; la circulation de la chaleur tend vers zéro.
- Domaine poly trope. Température variable ; il existe une circulation de chaleur.
- Domaine isotherme. Température constante ; la circulation de chaleur tend vers la chaleur de réaction [7].

#### 1.2.2.4 Classification selon le régime d'écoulement

Selon le régime d'écoulement, dès l'instant où l'on considère une opération continue on distingue deux types de réacteurs :

##### ➤ **Parfaitement agité**

Dans le cas d'une cuve parfaitement agitée, le réactif entrant dans le réacteur se trouve brusquement plongé dans un environnement (milieu réactionnel) qui a une composition identique à celle du flux sortant du réacteur. Au niveau de l'entrée du réacteur, on a donc une discontinuité des concentrations dans le flux entrant, alors que, dans l'ensemble du milieu réactionnel contenu dans le réacteur, les concentrations des diverses espèces chimiques sont uniformes [1].

##### ➤ **Tubulaires (piston)**

Dans le cas du réacteur tubulaire, l'espèce chimique progresse en même temps que son environnement tout au long du tube en se transformant progressivement. On conçoit donc que s'établisse un profil, continu et décroissant, de concentration du réactif considéré entre

l'entrée et la sortie du réacteur. C'est ainsi que ce type de réacteur est parfois qualifié de réacteur à gradient de concentrations.

Un cas intermédiaire entre ces deux modèles idéaux est ce que l'on appelle **le réacteur étagé**, constitué par une série de zones parfaitement agitées. Au lieu d'avoir une brusque discontinuité des concentrations à l'entrée du réacteur, on a une série de discontinuités moindres à l'entrée de chacune des zones parfaitement agitées [1].

#### 1.2.2.5 Circulation des phases

De la même façon que pour les appareils de séparation, on a le choix entre divers modes de circulation des phases :

- **Courants parallèles (ou co-courant),**
- **Courants croisés ou à contre-courant,**

Le rôle primordial joué par la transformation chimique fait que l'arrangement à contre-courant n'est plus forcément optimal comme dans le cas d'un processus purement physique. C'est pour cette raison aussi que la rétention de chaque phase volume, 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 de type tubulaire (cas d'un fermenteur par exemple) [1].

### 1.2.3 Type de réacteurs chimiques idéaux

Les réacteurs idéaux sont des configurations réactionnelles particulièrement simple, où les conditions hydrodynamiques et physiques sont supposés idéalisés et bien déterminés :

Cuve parfaitement agitée, écoulement piston parfait, perte de charge et phénomènes de diffusion négligeables, absence de gradient de concentration et de température, etc.

Ces configurations idéales permettent d'approcher le fonctionnement des réacteurs industriels et de comprendre l'influence des paramètres critiques pour le fonctionnement des

réacteurs réels dont ils donnent l'image. En outre, les réacteurs idéaux constituent les briques élémentaires des modèles utilisés pour décrire des réacteurs réels plus complexes [8].

La combinaison des divers régimes, des modes de mise au contact des phases en présence, ainsi que l'association de zones à régime d'écoulement défini permettent de classer la plupart des réacteurs industriels [9].

A partir des critères évoqués ci-dessus, il est possible maintenant de dresser une classification des divers réacteurs rencontrés en pratique.

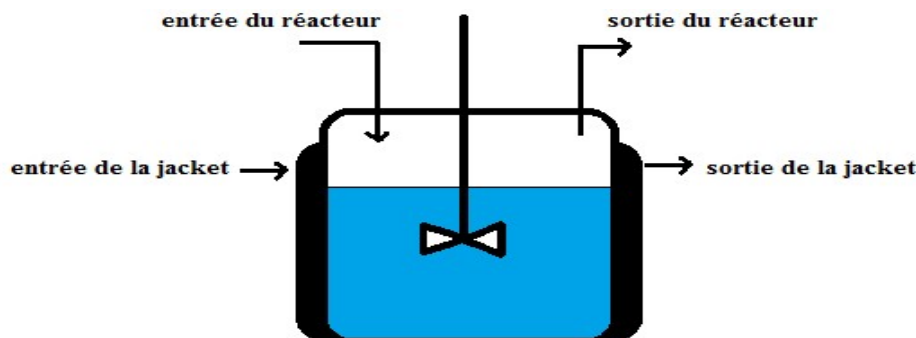
### 1.2.3.1 Réacteur parfaitement agité continu

Un tel réacteur comporte essentiellement une cuve muni d'un système d'agitation, d'une tubulaire d'alimentation et d'une tubulaire de soutirage. Dans son principe, le fonctionnement d'un réacteur parfaitement agité est simple, on suppose qu'en tout point d'un tel appareillage les variables intensives tel que la concentration ou la température ont la même valeur [5].

On peut classer ce type de réacteur selon le régime thermique en deux types

#### ➤ Réacteur parfaitement agité continu non isotherme

Dans ce régime la température évolue en fonction du temps ce qui correspond en générale à la phase de la mise en marche du réacteur, ou dans le cas où le fonctionnement du réacteur est prévu autour d'un point instable dans ce cas le réacteur doit être doté d'une surface d'échange de chaleur et d'un système de la régulation de la température, pour éviter un fonctionnement exotique [5].



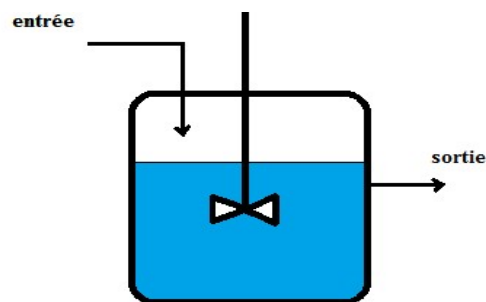
**Figure 1.3:** schéma de principe d'un réacteur parfaitement agité continu avec surface d'échange [5].

➤ **Réacteur parfaitement agité continu isotherme**

Correspond à un fonctionnement stationnaire du réacteur où la température et tous les autres variables sont constantes [5].

➤ **Réacteur parfaitement agité adiabatique**

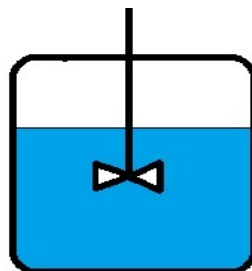
Le réacteur fonctionne en marche adiabatique lorsqu'il n'échange pas de la chaleur avec le milieu extérieur. C'est le cas d'une réaction adiabatique [5].



**Figure 1.4** : schéma de principe d'un réacteur parfaitement agité continu [5].

### 1.2.3.2 Réacteur parfaitement agité fermé

C'est un appareillage dans lequel les réactifs sont introduits au début de l'opération ; après avoir été mis en condition de température et de pression, la réaction se déroule jusqu'au taux de transformation désiré [9].



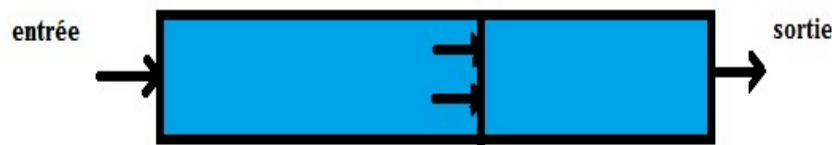
**Figure 1.5** : schéma de principe d'un réacteur agité fermé [9].

### 1.2.3.3 Réacteur tubulaire à écoulement piston

Le réacteur à écoulement piston est une représentation idéale du réacteur tubulaire réel, dans ce réacteur (REP) le mélange réactionnel se déplace par tranche parallèle.

Dans ce réacteur on considère que le mélange radial est maximal (profil plat de la vitesse d'écoulement), et le mélange axial est nul (existence de gradient de concentration et de température suivant l'axe de l'écoulement)

Dans un réacteur piston une condition nécessaire et suffisante de l'écoulement est que toutes les particules entrées ensemble aient le même temps de séjour dans le réacteur [5].



**Figure 1.6 :** schéma de principe d'un réacteur continu tubulaire à écoulement piston [5].

### 1.2.3.4 Réacteurs catalytiques (poly phasiques)

Parmi les réacteurs poly phasiques, les réacteurs catalytiques sont les plus répandus. Ils se distinguent à la fois par le mode de chauffage, le mode de travail (continu, périodique, cyclique), la nature du catalyseur (solide, liquide), le mode de récupération ou de régénération du catalyseur.

La phase fluide (liquide ou gaz) doit entrer en contact avec la phase solide qui constitue le catalyseur. La condition essentielle pour obtenir une réaction efficace étant le transfert rapide de masse [9, 10].

## 1.3 Généralité sur la réaction chimique

Une réaction chimique est la modification de l'assemblage des atomes constituant les molécules de réactifs pour conduire à de nouvelles molécules, les produits.

La description complète d'une telle transformation nécessite trois volets, dont deux ne dépendent que des états initial et final (l'aspect quantitatif et l'aspect thermodynamique) alors que le troisième nécessite la connaissance du mécanisme réactionnel, c'est l'aspect dynamique ou cinétique [11].

### 1.3.1 Cinétique chimique

Étude des vitesses des réactions, des facteurs qui influent sur celles-ci, et de la séquence des évènements moléculaires, appelée mécanisme réactionnel, selon laquelle les réactions se déroulent. Qualitativement, on remarque qu'il existe :

- Des réactions « **rapides** » : par exemple les réactions de dosage
- Et des réactions très « **lentes** » : oxydation de la plupart des métaux à l'air,

Transformation du carbone diamant en carbone graphite, etc [11].

#### 1.3.1.1 Vitesse de réaction

La vitesse d'une réaction chimique est définie comme étant la quantité de matière transformé (apparition ou disparition) par unité de temps et par unité d'une extensité qui dépend du problème traité : volume, masse, surface etc. la vitesse mesure donc un débit spécifique de transformation chimique [12,13].

#### 1.3.1.2 Facteurs cinétiques

Les paramètres qui agissant sur la vitesse d'évolution d'un système chimique sont appelés des facteurs cinétiques :

- Les concentrations des réactifs.
- La température du milieu.
- La présence de substances autres que les réactifs (catalyseurs, initiateurs ou amorceurs).
- L'éclairement (la lumière) [11].

#### ➤ Lois de vitesses

La loi de vitesse est une relation mathématique entre la vitesse de la réaction et les concentrations des différentes espèces.

La vitesse d'une réaction chimique :  $a A + b B \rightarrow \text{Produits}$  sera augmentée si les quantités des réactifs A et B sont élevées ce qui entraîne d'un aspect statistique une grande probabilité de rencontre entre les deux espèces A et B accompagnée d'une transformation en produits.

La vitesse volumique de la réaction peut s'exprimer sous une autre forme, faisant intervenir les concentrations des réactifs de la façon suivante [11] :

$$r = k[A]^\alpha[B]^\beta \quad (1.1)$$

#### ➤ Loi d'Arrhenius

Expérimentalement, on voit que la vitesse des réactions augmente généralement avec la température. La dépendance de la vitesse vis-à-vis de la température se trouve dans l'expression de k selon la loi d'Arrhenius [11] :

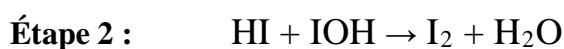
$$k = Ae^{-\left(\frac{E_a}{RT}\right)} \quad (1.2)$$

## 1.4 Les réactions complexes

Ce sont des réactions composées de plusieurs réactions élémentaires s'effectuant successivement ou simultanément.

Dans le cas où la réaction à presque toujours lieu en deux ou plusieurs étapes. On dit que c'est une réaction complexe, dont chaque étape ne met pas en jeu plus de deux molécules et constitue une réaction élémentaire [14].

**Exemple :** La réaction  $2 \text{HI} + \text{H}_2\text{O}_2 \rightarrow \text{I}_2 + 2 \text{H}_2\text{O}$  se réalise en deux étapes :





La première étape donne une molécule d'eau « définitive » et un intermédiaire (IOH), qui est consommé dans la seconde étape en même temps qu'une seconde molécule HI. Cet intermédiaire ne figure donc pas dans le bilan global.

Le nombre d'étape d'une réaction complexe est très variable selon les cas. D'autre part, ces étapes peuvent s'organiser selon des schémas divers : réactions successives, réactions en parallèle, réactions en chaîne... ; les réactifs initiaux peuvent intervenir à nouveau dans une étape ultérieure, certaines étapes peuvent être inversibles, etc [14].

## 1.5 Equations de Bilans dans les systèmes ouverts (continu)

### 1.5.1 Bilan molaire

Le bilan molaire pour un procédé s'écrit [15] :

$$\frac{d(C_k V)}{dt} = \sum_{i=1}^{i=m} C_{ki} f_i - \sum_{j=1}^{j=r} C_{kj} f_j + r_k V \quad (1.3)$$

Le terme,  $r_k V$  dans l'équation (1.3) représente l'effet des réactions chimiques.

$C_{ki}$ ,  $C_{kj}$ ,  $C_k$  : Concentration molaires du constituant, k à l'entrée, à la sortie et dans le procédé, respectivement.

V : Volume.

$f_i$ ,  $f_j$  : Débits volumiques des courants d'entrée et de sortie.

m : Nombre de courants d'entrée relatif au constituants k.

r : Nombre de courants de sortie relatif au constituants k

$r_k$  : Vitesse de réaction /unité de volume relative au constituant k.

### 1.5.2 Bilan énergétique

Le bilan énergétique pour un procédé s'écrit [15] :

$$\frac{d(\rho V C_P T)}{dt} = \sum_{i=1}^{i=m} \rho_i f_i C_{pi} T_i - \sum_{j=1}^{j=r} \rho_j f_j C_{pj} T_j + \sum_{l=1}^{l=s} Q_l \quad (1.4)$$

$C_{pi}$ ,  $C_{pj}$ ,  $C_P$  : Chaleurs spécifiques des courants d'entrée, de sortie et dans le procédé, respectivement.

$T_i, T_j, T$  : Température des courants d'entrée, de sortie et dans le procédé, respectivement.

$Q_1$  : Quantité de chaleur / unité de temps.

$S$  : nombre de sources de chaleur.

$i$  : courant d'entrée.

$j$  : courant de sortie.

## 1.6 CONCLUSION

Dans ce chapitre, nous avons présenté une étude bibliographique sur les réacteurs chimiques. A cet égard, nous avons présenté les réacteurs, leurs classifications et leurs types. Ainsi nous avons présenté les réactions chimiques et plus précisément les réactions chimiques complexes.

Le chapitre suivant sera consacré au réacteurs parfaitement agité continu non isotherme, ou on va présenter le modèle mathématique ainsi que les différentes fonctions Matlab afin de simuler son comportement.

# CHAPITRE 2

## CHAPITRE 2

### MODÈLES MATHÉMATIQUES DU RÉACTEUR

#### 2.1 Introduction

La modélisation des réacteurs chimiques occupe une place très importante dans l'industrie chimique, car dans de nombreux cas l'expérience est presque impossible ou trop chère, ou bien elle présente des risques sur les installations, donc c'est pour cela on fait recours à la technique de modélisation.

Dans ce chapitre, on va présenter le modèle mathématique en régime dynamique et en régime stationnaire pour un réacteur parfaitement agité continue non isotherme dans lequel se déroule une réaction chimique complexe. Aussi, la méthode de résolution numérique du modèle mathématique du réacteur ainsi que les conditions initiales et les paramètres seront présentés.

#### 2.2 Modèle mathématique

Pour la présente étude, le procédé est constitué d'un réacteur parfaitement agité continu, comme illustré en figure 2.1, et dans lequel se déroule la réaction complexe suivante :



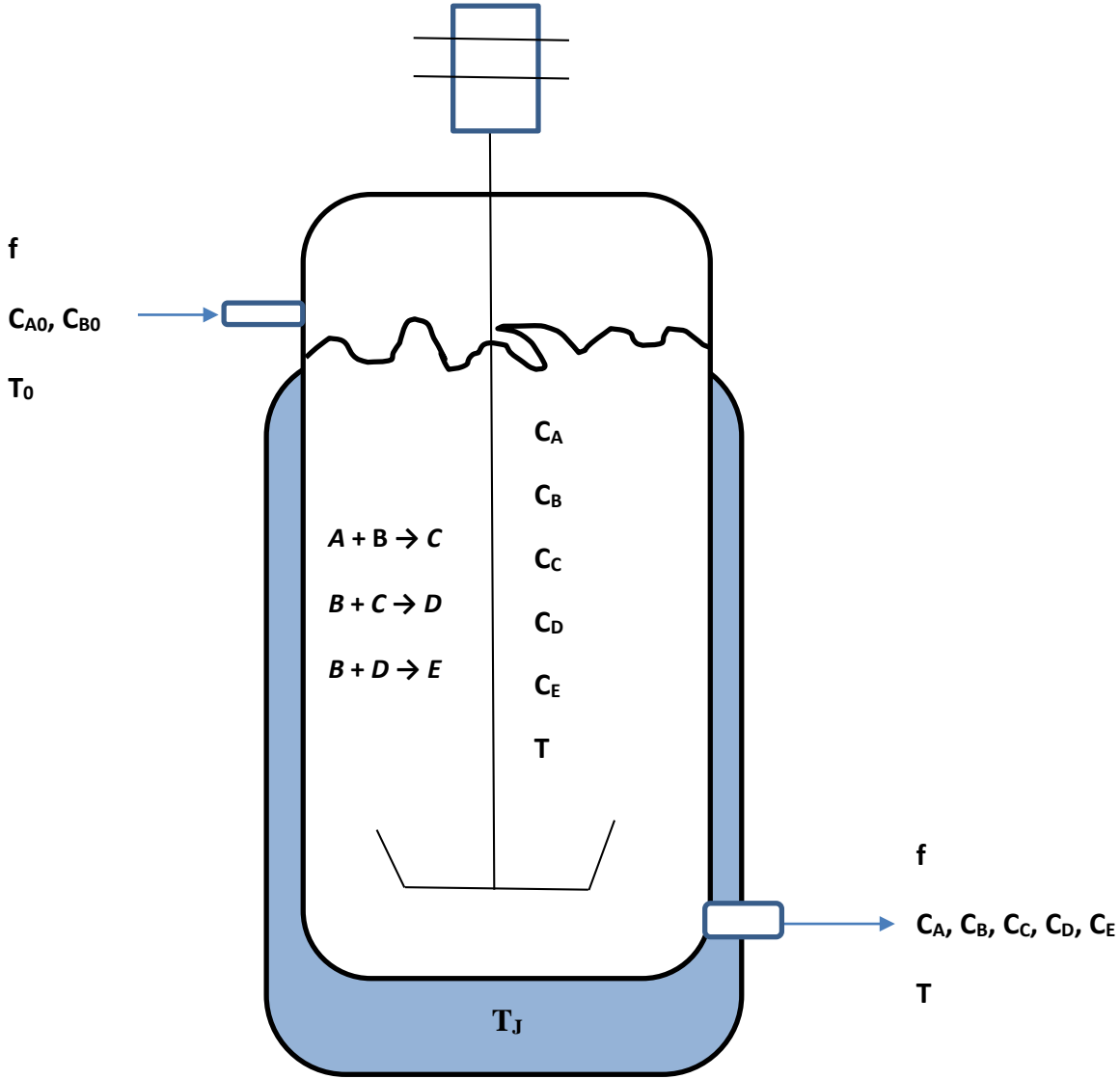


Figure 2.1 : Schéma d'un réacteur parfaitement agité à une seule entrée et une seule sortie.

## 2.2.1 Modèle mathématique en régime dynamique

En se basant sur les équations générales de bilans pour les systèmes ouverts, vues au chapitre 1 (& 1.5), et en considérant que le volume  $v$ , le débit  $f$  ainsi que les propriétés physiques  $C_{pk}$  sont constants, les équations de bilans molaire et énergétique pour le réacteur chimique parfaitement agité continu utilisé dans notre étude sont présentés comme suit :

### 2.2.1.1 Bilan molaire

En appliquant l'équation générale (1.3) présentée au chapitre 1, les équations de bilan molaire pour le procédé s'écrivent comme suit :

- Pour le constituant A :

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{f}{V} (C_{A0} - C_A) - k_1 \cdot C_A \cdot C_B \quad (2.1)$$

- Pour le constituant B :

$$\frac{dC_B}{dt} = \frac{f}{V} (C_{B0} - C_B) - k_1 \cdot C_A \cdot C_B - k_2 \cdot C_B \cdot C_C - k_3 \cdot C_B \cdot C_D \quad (2.2)$$

- Pour le constituant C :

$$\frac{dC_C}{dt} = \frac{f}{V} (C_{C0} - C_C) + k_1 \cdot C_A \cdot C_B - k_2 \cdot C_B \cdot C_C \quad (2.3)$$

- Pour le constituant D :

$$\frac{dC_D}{dt} = \frac{f}{V} (C_{D0} - C_D) + k_2 \cdot C_B \cdot C_C - k_3 \cdot C_B \cdot C_D \quad (2.4)$$

- Pour le constituant E :

$$\frac{dC_E}{dt} = \frac{f}{V} (C_{E0} - C_E) + k_3 \cdot C_B \cdot C_D \quad (2.5)$$

### 2.2.1.2 Bilan énergétique

Le bilan énergétique pour le procédé s'écrit comme suit :

$$V \frac{d}{dt} \left( \sum_{i=1}^5 C_k \cdot C_{Pk} \right) T = f(C_{A0} \cdot C_{PA} + C_{B0} \cdot C_{PB}) (T_0 - T) + U \cdot A (T - T_j) \quad (2.6)$$

$C_{pk}$  : représente la chaleur spécifique molaire du constituant k.

Le modèle mathématique du réacteur en régime dynamique est constitué des équations (2.1), (2.2), (2.3), (2.4), (2.5), (2.6) et les conditions initiales ainsi que les paramètres regroupé dans le tableau (2.1)

### 2.2.2. Modèle mathématique en régime stationnaire

Dans le cas du régime stationnaire, les termes  $\frac{dC_K}{dt}$  et  $\frac{dT}{dt}$  dans les l'équations (1.3) et (1.4) du chapitre 1 devient égal à zéro. Dans ce cas, le bilan molaire pour le procédé s'écrit :

- Pour le constituant A :

$$0 = \frac{f}{V} (C_{A0} - C_A) - k_1 \cdot C_A \cdot C_B \quad (2.7)$$

- Pour le constituant B :

$$0 = \frac{f}{V} (C_{B0} - C_B) - k_1 \cdot C_A \cdot C_B - k_2 \cdot C_B \cdot C_C - k_3 \cdot C_B \cdot C_D \quad (2.8)$$

- Pour le constituant C :

$$0 = \frac{f}{V} (C_{C0} - C_C) + k_1 \cdot C_A \cdot C_B - k_2 \cdot C_B \cdot C_C \quad (2.9)$$

- Pour le constituant D :

$$0 = \frac{f}{V} (C_{D0} - C_D) + k_2 \cdot C_B \cdot C_C - k_3 \cdot C_B \cdot C_D \quad (2.10)$$

- Pour le constituant E :

$$0 = \frac{f}{V} (C_{E0} - C_E) + k_3 \cdot C_B \cdot C_D \quad (2.11)$$

Aussi le bilan énergétique pour le procédé s'écrit :

$$0 = \frac{f}{V} (C_{A0} \cdot C_{PA} + C_{B0} \cdot C_{PB}) (T_0 - T) + U \cdot A (T - T_j) \quad (2.12)$$

Le modèle mathématique du procédé en régime stationnaire est constitué des équations (2.7), (2.8), (2.9), (2.10), (2.11) et (2.12) et les conditions initiales ainsi que les paramètres regroupés dans le tableau ci-dessous :

**Tableau 2.1** : conditions initiales et paramètres utilisées pour la simulation du réacteur [16].

Concentrations initiales :	
$C_{A0}$	400 mol/m <sup>3</sup>
$C_{B0}$	600 mol/m <sup>3</sup>
$C_{C0}$	0 mol/m <sup>3</sup>
$C_{D0}$	0 mol/m <sup>3</sup>
$C_{E0}$	0 mol/m <sup>3</sup>
Température initiale :	
$T_0$	297 K
Constantes de Vitesse :	
$K_1$	0.00003 m <sup>3</sup> /mol.min
$K_2$	0.003 m <sup>3</sup> /mol.min
$K_3$	0.0012 m <sup>3</sup> /mol.min
Capacités calorifiques :	
$C_{pA}$	75.25 J/mol.k
$C_{pB}$	175.30 J/mol.k
$C_{pC}$	78.20 J/mol.k
$C_{pD}$	103.80 J/mol.k
$C_{pE}$	100.21 J/mol.k
Volume du réacteur :	
$V$	1 m <sup>3</sup>
Débit d'alimentation :	
$f$	6 m <sup>3</sup> /min
Température de l'enveloppe :	
$T_j$	302 K
Surface d'échange :	
$A$	0.0177 m <sup>2</sup>
Coefficient de transfert de chaleur :	
$U$	0.0417 W.m <sup>2</sup> .K <sup>-1</sup>



### 2.3 Résolution numérique du modèle mathématique

Le logiciel de calcul scientifique Matlab (R2012a) à travers le solveur (ode 45) est utilisé pour résoudre les systèmes d'équation en régime dynamique définit par les équation (2.1), (2.2), (2.3), (2.4), (2.5) et (2.6). A cet égard, la fonction fsolve a été utilisé pour résoudre le système d'équation du régime stationnaire définit par les équations (2.7), (2.8), (2.9), (2.10), (2.11) et (2.12).

### 2.4 CONCLUSION

Dans ce chapitre on a présenté le modèle mathématique du procédé en régime stationnaire et en régime dynamique du réacteur parfaitement agité continu dans lequel se déroule une réaction complexe.

La méthode de résolution du modèle mathématique en régime stationnaire et en régime dynamique a été présenté, Après la résolution du modèle mathématique, avec le logiciel de calcul scientifique MATLAB (R2012 a), à l'aide du solveur Ode 45 pour le régime dynamique, les résultats du régime stationnaire par fsolve, les résultats seront présentés et discutés dans le chapitre suivant.

# CHAPITRE 3

## CHAPITRE 3

### RÉSULTATS ET DISCUSSIONS

#### 3.1 Introduction.

Après avoir présenté les équations du modèle mathématique du procédé ainsi que la procédure de résolution numérique dans le chapitre précédent, ce chapitre présente les principaux résultats obtenus lors de la simulation en régime stationnaire et en régime dynamique. A cet égard, ces résultats concernent les concentrations des constituants en régime stationnaire et l'évolution des concentrations des constituants, Ainsi que l'évolution de la température du réacteur en régime dynamique. L'effet des conditions d'entrée sur le comportement du réacteur sera étudié.

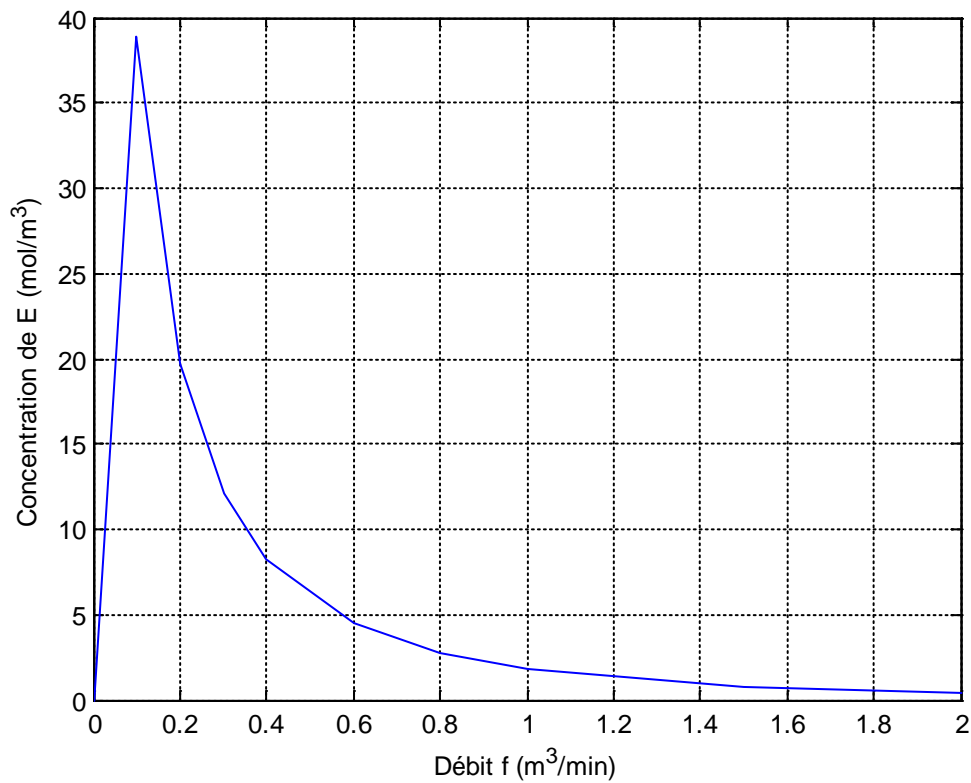
#### 3.2 Simulation en régime stationnaire

Les valeurs des concentrations des constituants A, B, C, D et E, ainsi que la température du réacteur en régime stationnaire sont calculés en utilisant la fonction fsolve dans le logiciel de calcul scientifique MATLAB. Ces valeurs sont regroupées dans le tableau ci-dessous :

**Tableau 3.1** : Valeurs en régime stationnaire des variables du réacteur.

Paramètre	Valeur à l'état stationnaire
$C_{AS}$	398.8066 mol/m <sup>3</sup>
$C_{BS}$	598.5023 mol/m <sup>3</sup>
$C_{CS}$	0.9186 mol/m <sup>3</sup>
$C_{DS}$	0.2455 mol/m <sup>3</sup>
$C_{ES}$	0.0294 mol/m <sup>3</sup>
$T_0$	297.2862 K
f	6 m <sup>3</sup> /min

Par ailleurs le modèle mathématique en régime stationnaire est utilisé pour la recherche du débit optimal, assurant la meilleure concentration du produit désiré E. Ainsi, la figure 3.1 présente l'évolution de la concentration du produit désiré E en fonction du débit.



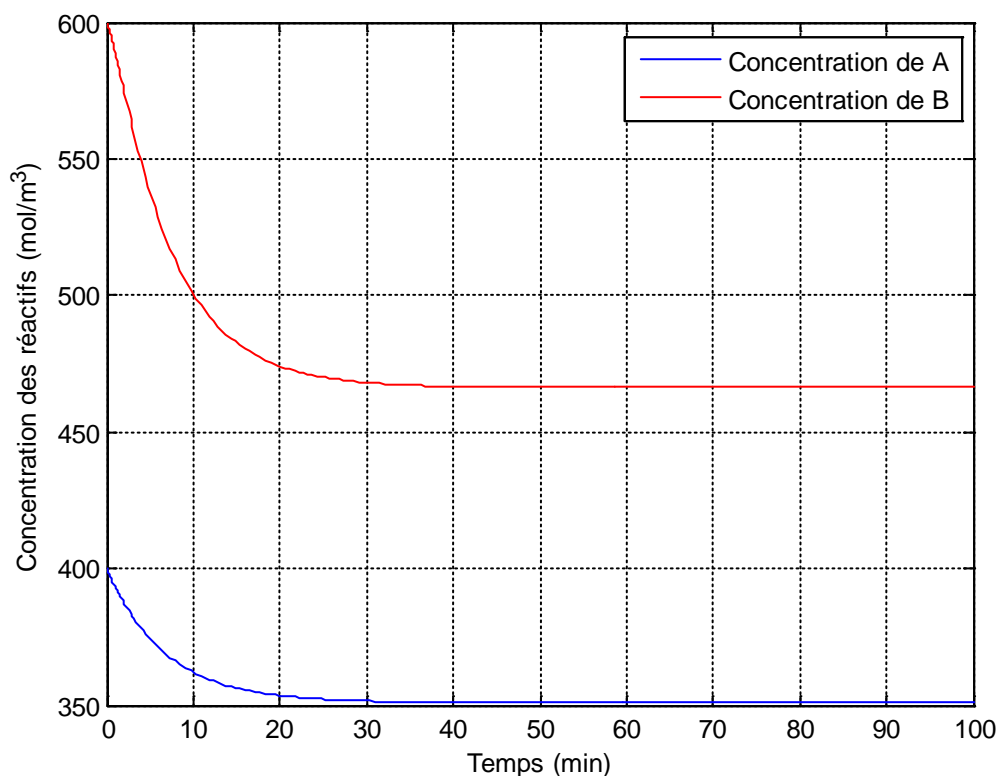
**Figure 3.1 :** Evolution de la concentration de E en fonction du débit d'alimentation  $f$  à l'état stationnaire.

A travers cette figure on constate que la concentration de E augmente rapidement jusqu'à  $0.1 \text{ m}^3/\text{min}$  qui est la valeur maximale puis elle diminue considérablement de  $0.1$  à  $1.8 \text{ m}^3/\text{min}$  ou elle commence à se stabiliser, le point optimal est au débit volumétrique de  $f=0.1 \text{ m}^3/\text{min}$  et a une concentration de  $39 \text{ mol}/\text{m}^3$ . Cette valeur de débit sera utilisée pour la simulation dynamique du comportement du réacteur.

### 3.3 Simulation en régime dynamique

#### 3.3.1 Evolution des concentrations des réactifs

La figure 3.2 présente l'évolution des concentrations des réactifs A et B en fonction du temps.



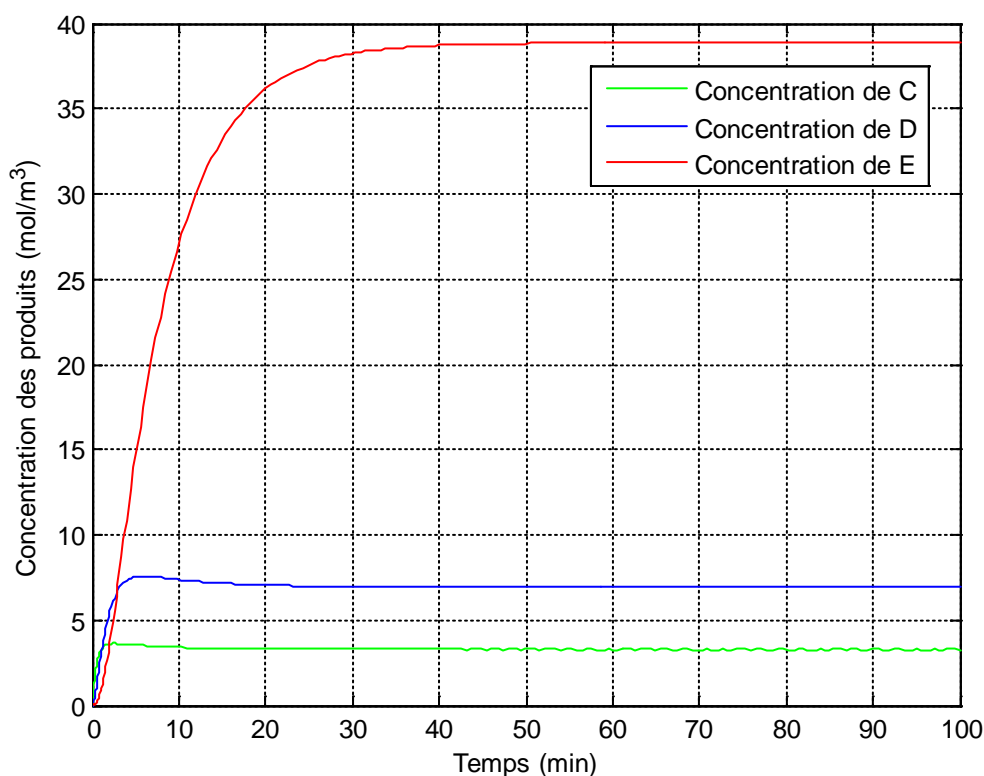
**Figure 3.2:** Evolution des concentrations de A et B en fonction du temps.

On observe à partir de la figure 3.2 que la concentration du réactif A, diminue progressivement en fonction du temps jusqu'à 31 min, où elle se stabilise à la valeur de 350 mol/m<sup>3</sup>.

La concentration du réactif B diminue rapidement jusqu'à atteindre la valeur 465 mol/m<sup>3</sup> pendant 36 min ou à partir de ce point la concentration du constituant se stabilise. La tendance observée indique que les constituants réagissant s'épuisent au fur et à mesure que la réaction progresse.

### 3.3.2 Evolution des concentrations des produits

La figure 3.3 présente l'évolution des concentrations des produits C, D et E en fonction du temps.



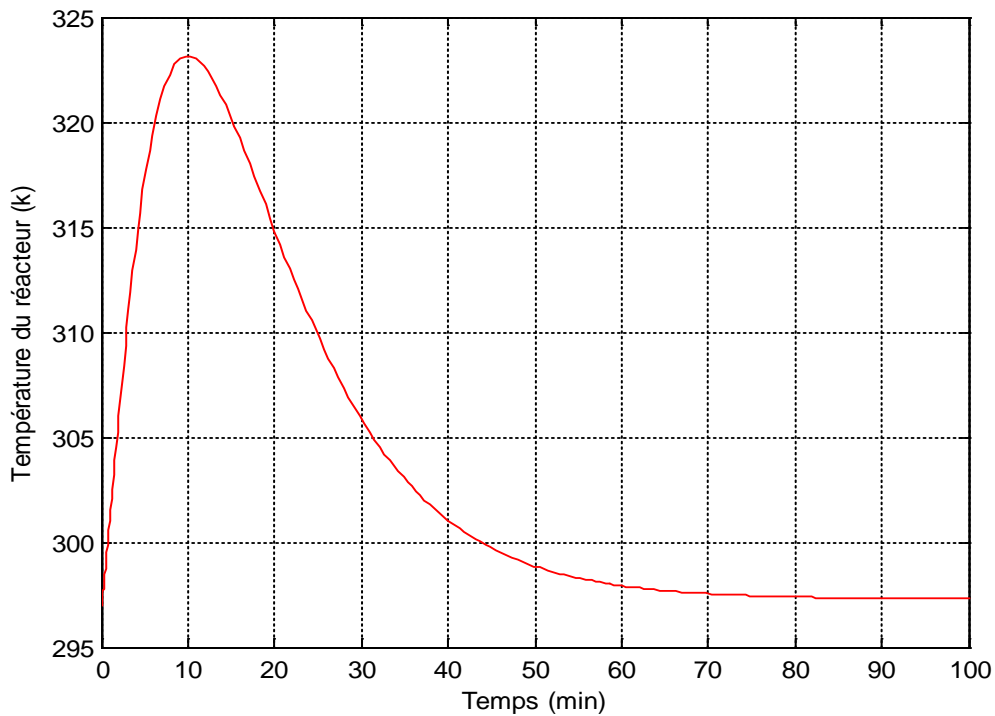
**Figure 3.3:** Evolution des concentrations de C, D et E en fonction du temps

La variation de la concentration des produits C, D et E est illustré à la figure 3.3. La tendance observée est telle que les concentrations de C augmente jusqu'à 2 min puis y'a une légère diminution jusqu'à 15 min c'est à partir de ce point que la concentration se stabilise à une valeur de 3.3 mol/m<sup>3</sup>. Le produit D augmente jusqu'à 5 min puis diminue légèrement jusqu'au temps de 23 min ou elle se stabilise, on peut déduire sa valeur qui est de 7 mol/m<sup>3</sup>.

Enfin le produit E augmente avec le temps, la plus forte augmentation se produisent dans le cas du constituant E, c'est le produit le plus concentré dans le réacteur. La concentration élevé observé pour le constituant E est due au fait qu'il s'agit du produit final et de tous les autres constituants présents dans le réacteur tel qu'utilisé au cours de la réaction pour le produire. On peut également observer sur la figure 3.3 que la concentration du constituant E atteint une valeur d'état stationnaire après environ 50 min pour une concentration de 39 mol/m<sup>3</sup>.

### 3.3.3 Evolution de la température du réacteur

La figure 3.4 présente l'évolution de la température de réaction en fonction du temps.

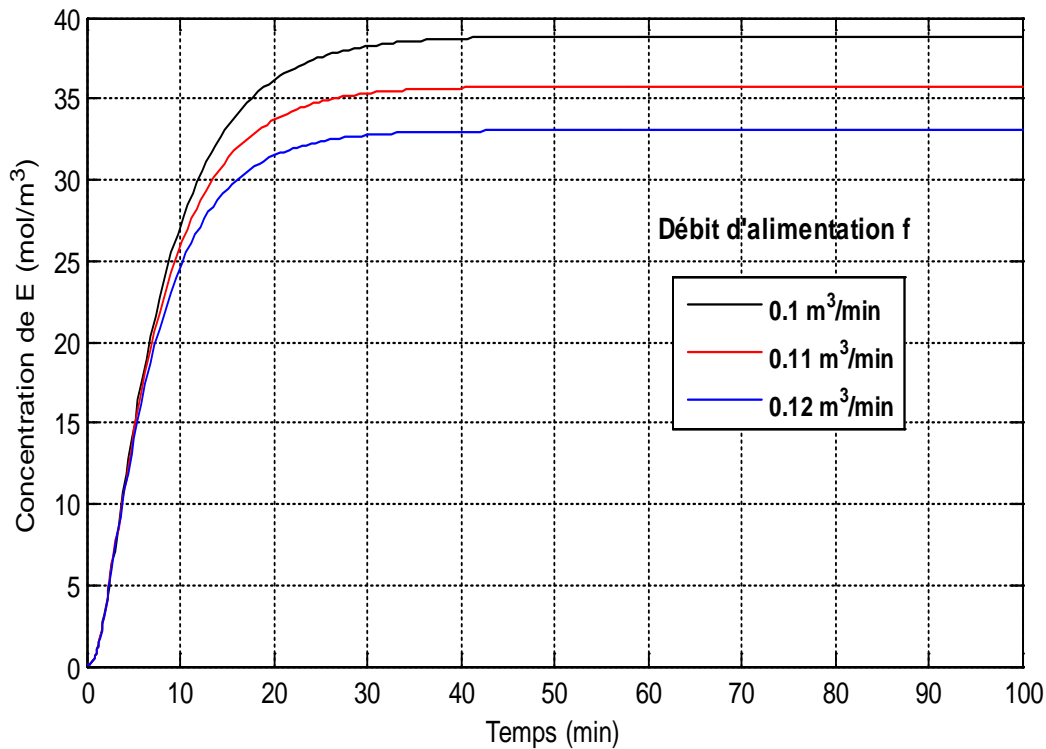


**Figure 3.4 :** Evolution de la température de réaction.

La figure 3.4 montre la trajectoire temporelle de la température de réaction à une température de flux d'entrée de 297 K. La température du contenu du réacteur a d'abord fortement augmenté jusqu'à atteindre une valeur maximale en 10 min d'environ 323 K. La température a ensuite diminué puis elle se stabilise au bout de 83 min ou elle atteint la valeur d'état stationnaire de 297 K.

### 3.3.4 Effet de la variation du débit d'alimentation (f)

La figure 3.5 présente l'évolution de la concentration du produit désiré E pour une augmentation de 10% du débit.

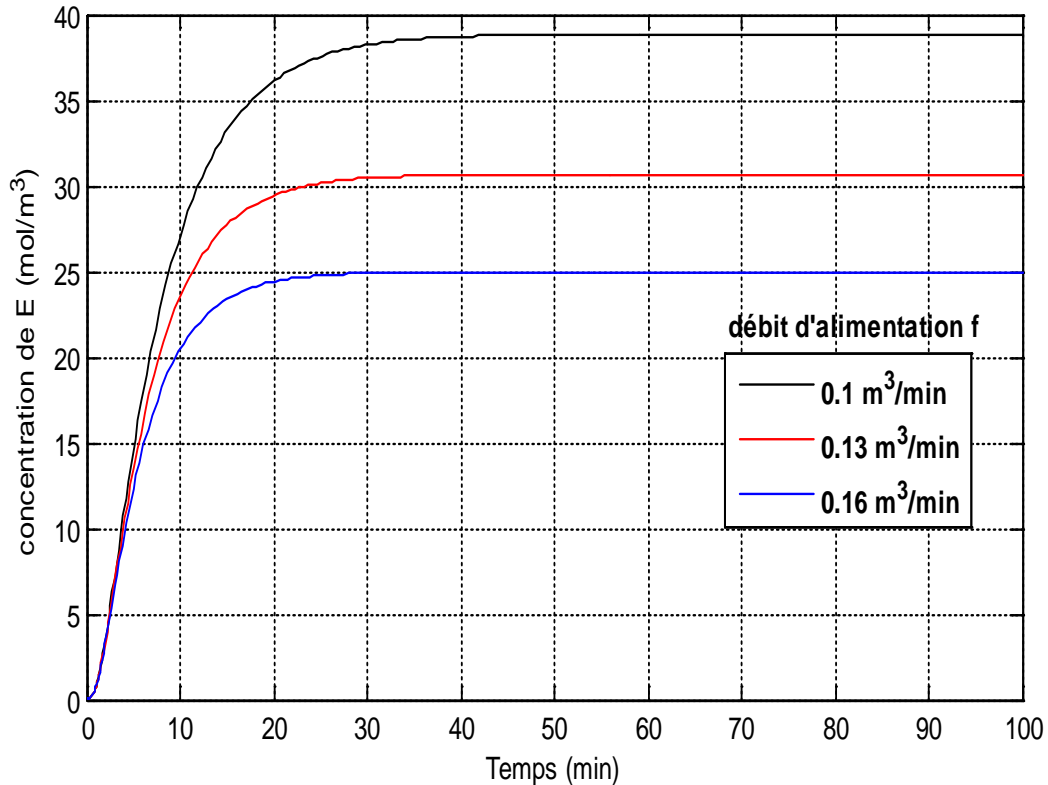


**Figure 3.5 :** Evolution de la concentration de E à une augmentation de 10% du débit f.

On peut observer à partir de cette figure qu'il y a un changement appréciable dans la réponse de la concentration du constituant E à ces changements du débit d'entrée. Cependant, l'augmentation du débit d'entrée augmente sensiblement la concentration de E à l'état stationnaire à un temps de 40 min ou les valeurs des concentrations sont respectivement 38,36 ; 36 et 33 mol/m<sup>3</sup>.



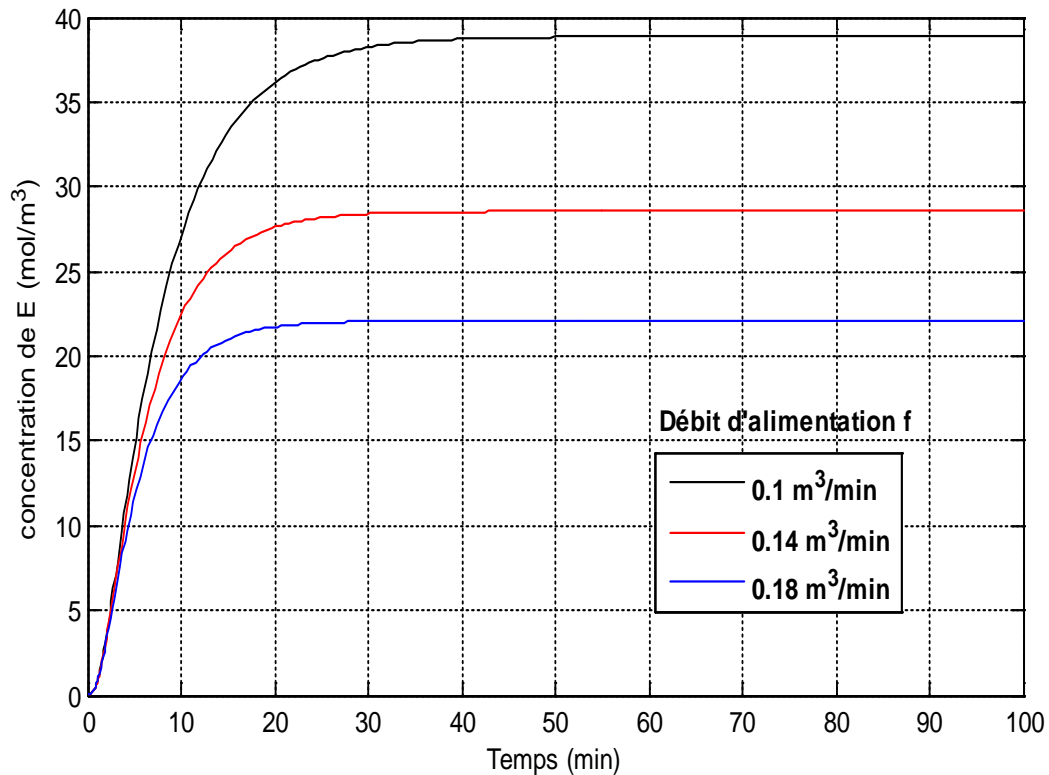
La figure 3.6 présente l'évolution de la concentration de E pour une augmentation de 30% du débit.



**Figure 3.6 :** Evolution de la concentration de E à une augmentation de 30% du débit f.

On peut observer à partir de cette figure qu'il y a un changement plus qu'appréciable dans la réponse de la concentration du constituant E à ces changements du débit d'entrée. Cependant, l'augmentation du débit d'entrée augmente sensiblement la concentration de E à l'état stationnaire a des temps différents qui sont respectivement 41, 33 et 28 min, ou les valeurs des concentrations sont 38, 31 et 25 mol/m<sup>3</sup>.

La figure 3.7 présente l'évolution de la concentration du produit désiré E pour une augmentation de 40% du débit.



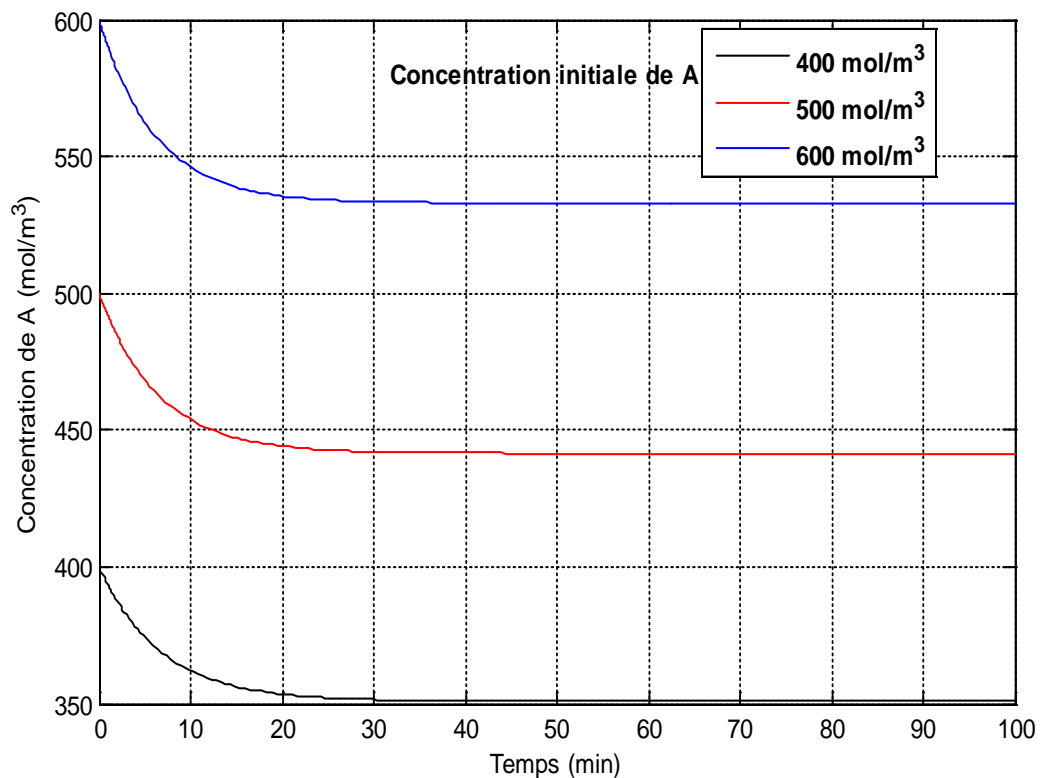
**Figure 3.7 :** Evolution de la concentration de E à une augmentation de 40% du débit f.

On peut observer à partir de cette figure qu'il y a un changement très appréciable dans la réponse de la concentration du constituant E à ces changements du débit d'entrée. Cependant, l'augmentation du débit d'entrée augmente sensiblement la concentration de E à l'état stationnaire a des temps différents qui sont respectivement 50, 43 et 27 min ou les valeurs des concentrations sont (38, 27 et 23 mol/m<sup>3</sup>).

### 3.3.5 Effet des conditions initiales

#### 3.3.5.1 Effet de la concentration initiale du réactif A

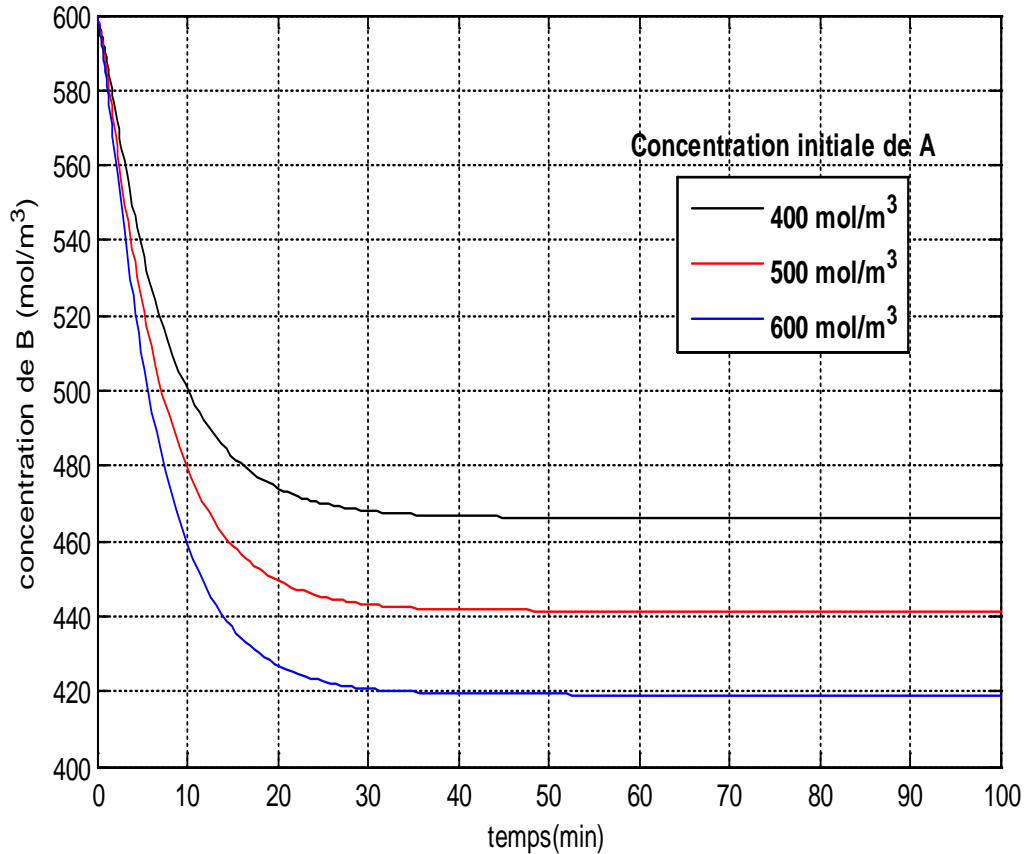
La figure 3.8 présente l'évolution de la concentration du réactif A en fonction du temps pour des valeurs de concentrations initiales de A ( $C_{A0}$ ).



**Figure 3.8 :** Evolution de la concentration d'A en fonction du temps pour plusieurs valeurs de  $C_{A0}$ .

Dans la figure 3.8 on observe que lorsqu'on augmente la concentration initiale  $C_{A0}$ , la concentration du réactif A diminue progressivement avec le temps jusqu'à ce qu'elle se stabilise aux environs de 30, 42 et 36 min respectivement pour les concentrations initiales  $C_{A0}$  de 400, 500 et 600 mol/m<sup>3</sup>.

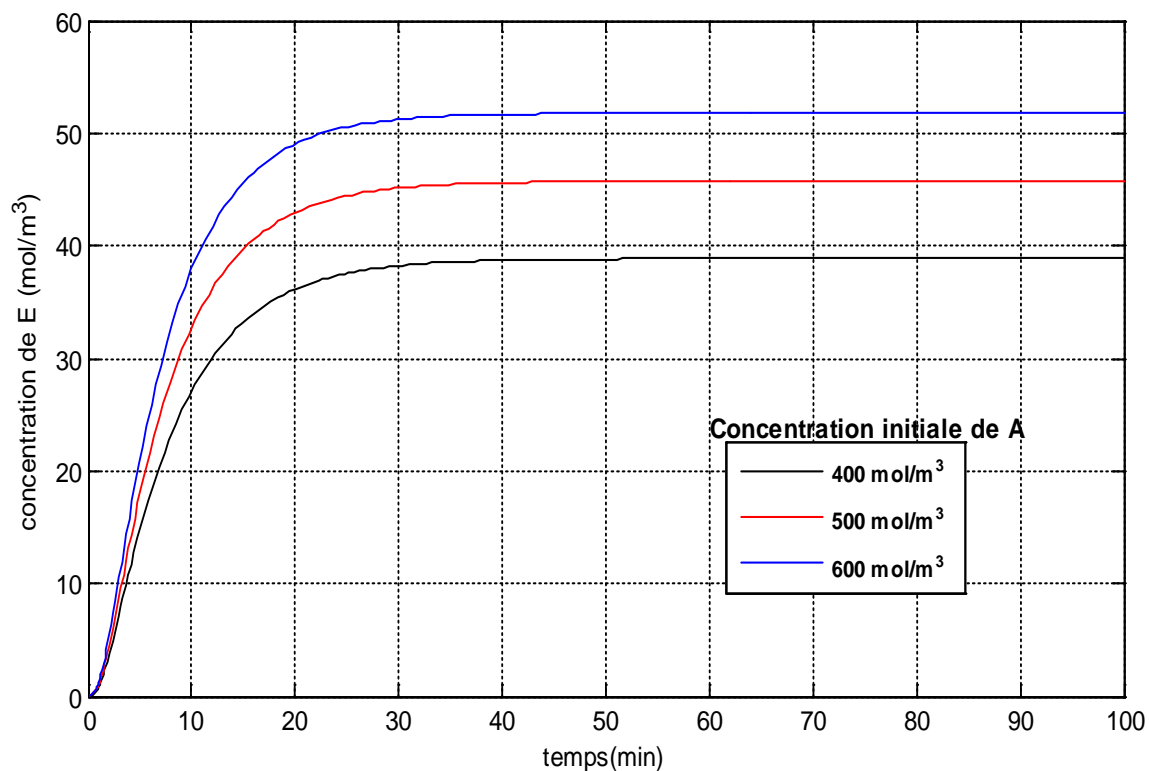
La figure 3.9 présente l'évolution de la concentration du réactif B en fonction du temps pour des valeurs de concentrations initiales d'A ( $C_{A0}$ ).



**Figure 3.9 :** Evolution de la concentration de B en fonction du temps pour plusieurs valeurs de  $C_{A0}$ .

On observe que plus la concentration  $C_{A0}$  augmente le réactif B se consomme plus rapidement et la concentration de B atteint le régime stationnaire au bout de 45, 48 et 52 min pour les concentrations respectives de 400, 500 et 600 mol/m<sup>3</sup>.

La figure 3.10 présente l'évolution de la concentration du produit désiré E en fonction du temps pour des valeurs de concentration initiale de A ( $C_{A0}$ ).



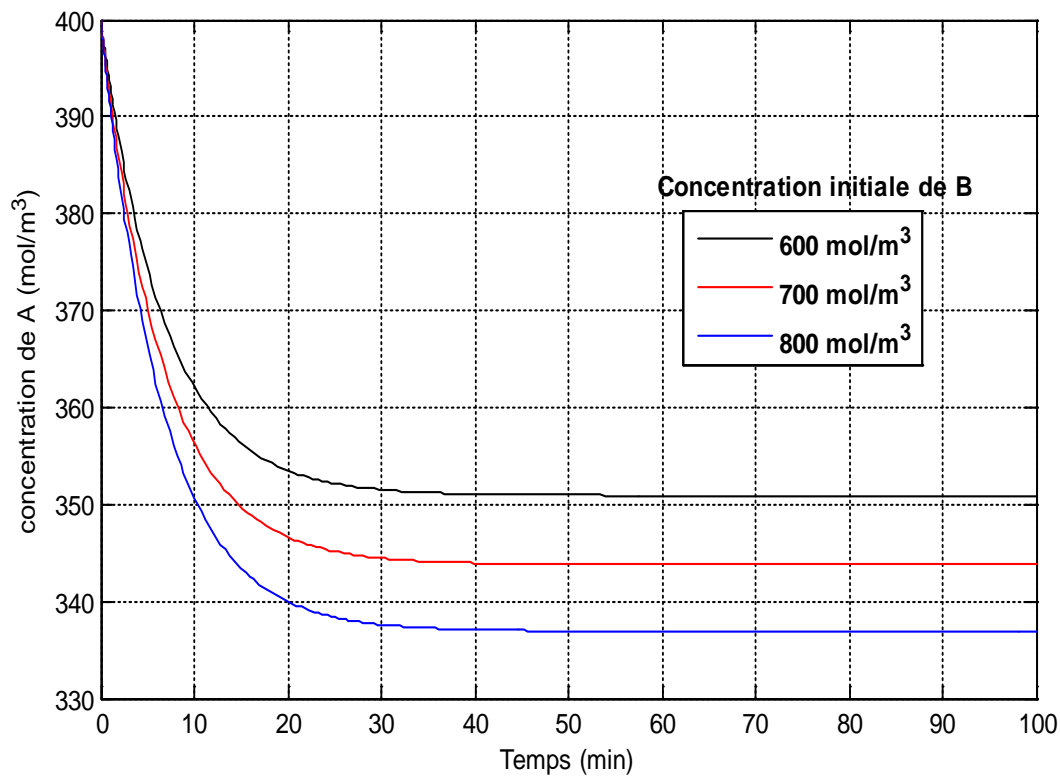
**Figure 3.10 :** Evolution de la concentration de E en fonction du temps pour plusieurs valeurs de  $C_{A0}$ .

On peut observer à partir de la figure 3.10 que la concentration de E augmente avec l'augmentation de  $C_{A0}$ . En effet la production de E devient plus rapide avec l'augmentation de la concentration initiale de A car plus il est augmenté plus y a une réaction longue plus y'a de production du produit désiré.

Ainsi la concentration de E se stabilise après environs 51, 41 et 42 min pour les concentrations de  $C_{A0}$  a des valeurs qui sont respectivement 39, 45 et 52 mol/m<sup>3</sup>.

### 3.3.5.2 Effet de la concentration initiale du réactif B

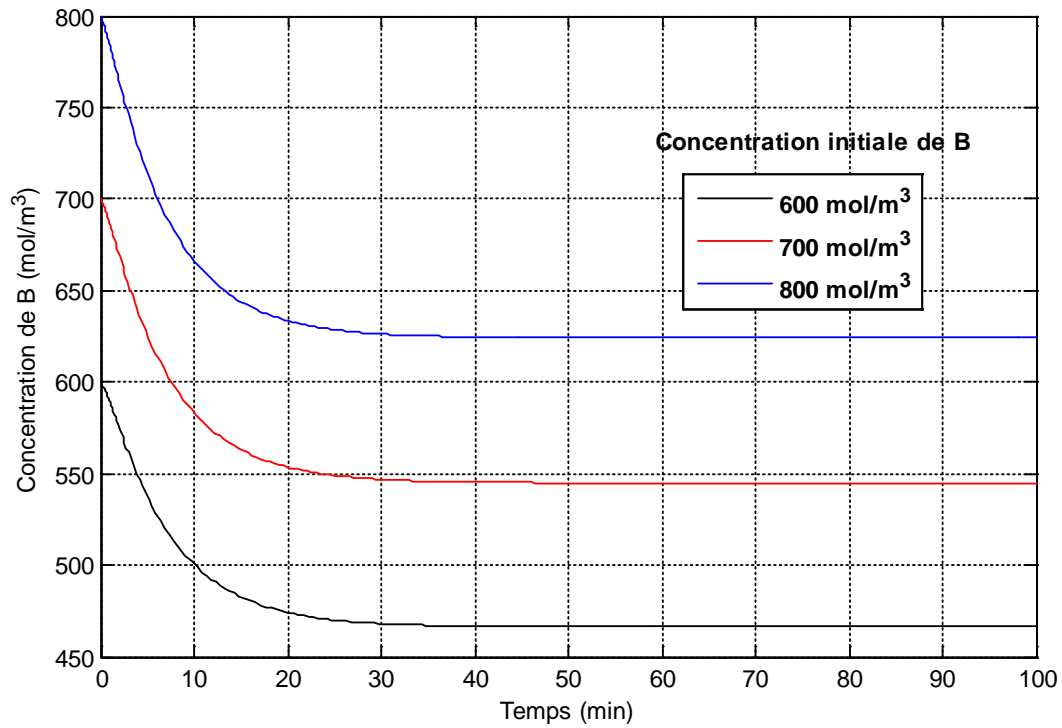
La figure 3.11 présente l'évolution de la concentration du réactif A en fonction du temps pour des valeurs de la concentration initiale de B.



**Figure 3.11** : Evolution de la concentration de A en fonction du temps pour plusieurs valeurs de  $C_{B0}$ .

On observe que plus la concentration  $C_{B0}$  augmente le réactif A se consomme plus rapidement et la concentration de A atteint le régime stationnaire aux environs de 39, 41 et 48 min pour les concentrations respectives de 600, 700 et 800 mol/m³.

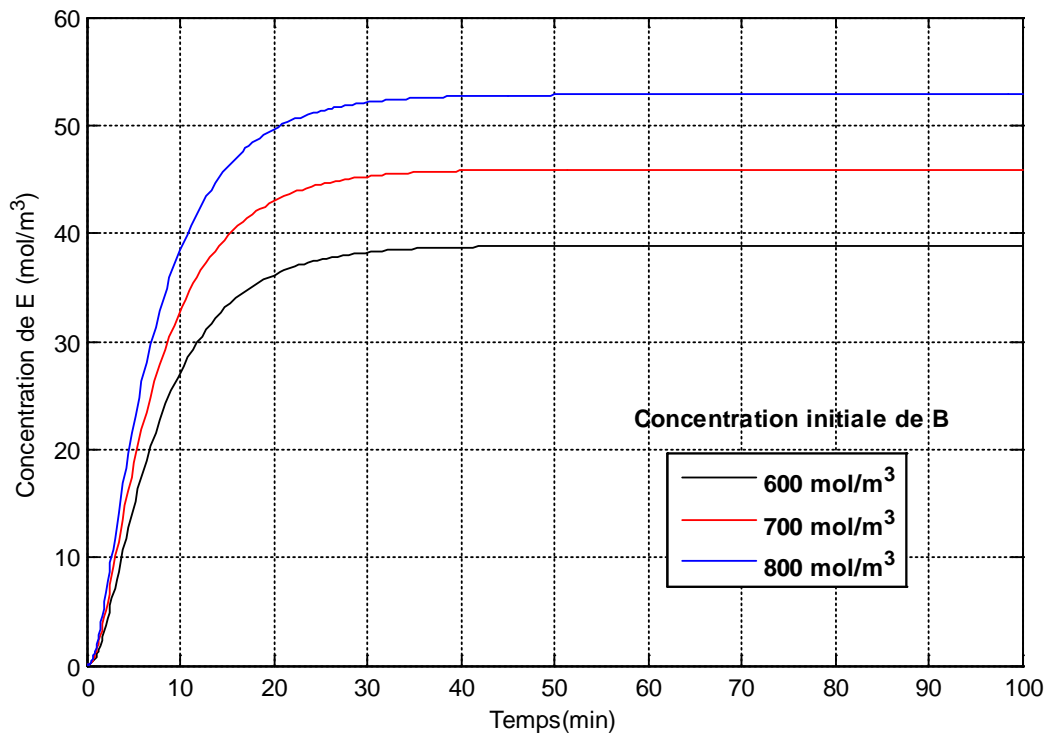
La figure 3.12 présente l'évolution de la concentration du réactif B en fonction du temps pour des valeurs de la concentration initiale de B



**Figure 3.12:** Evolution de la concentration de B en fonction du temps pour plusieurs valeurs de  $C_{B0}$ .

Dans la figure 3.12 on observe que lorsqu'on augmente la concentration initiale  $C_{B0}$ , la concentration du réactif B diminue progressivement avec le temps jusqu'à ce qu'elle se stabilise aux environs de 35, 46 et 37 min respectivement pour les concentrations initiales  $C_{B0}$  de 600, 700 et 800 mol/m<sup>3</sup>.

La figure 3.13 présente l'évolution de la concentration du produit désiré E en fonction du temps pour des valeurs de la concentration initiale de B.



**Figure 3.13 :** Evolution de la concentration de E en fonction du temps pour plusieurs valeurs de  $C_{B0}$ .

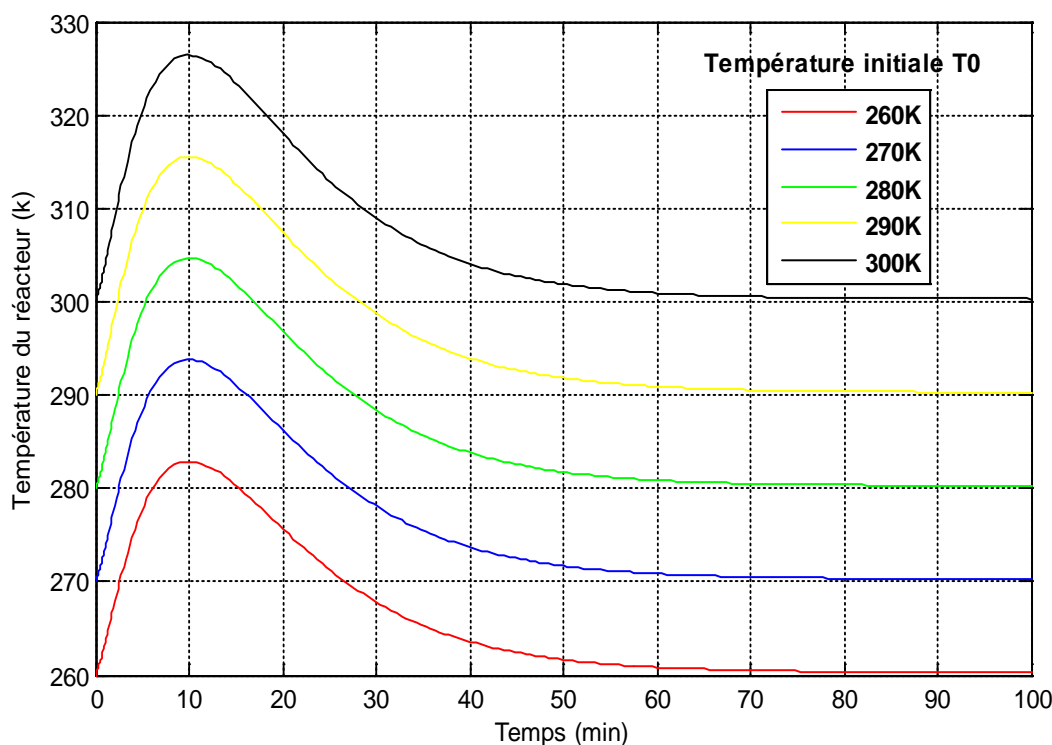
On observe à partir de la figure 3.13 que la concentration de E augmente avec l'augmentation de  $C_{B0}$ , en effet la production de E devienne plus rapide avec l'augmentation de la concentration initiale de B. Ainsi la concentration de E se stabilise après environ 40 min quel que soit  $C_{B0}$ .

C'est le produit le plus concentré, cette concentration est due au fait qu'il s'agit du produit final de tous les autres constituants.



### 3.3.5.3 Effet de la température initiale sur la température du réacteur

La figure 3.14 présente l'effet de la température d'entrée par rapport à celle du réacteur.



**Figure 3.14 :** Effet de la température d'entrée sur celle du réacteur.

Concernant la variation sur la température à l'entrée du réacteur, cette dernière n'affecte pas le comportement du réacteur. En effet, après changement de la température initiale  $T_0$  de 10 K, la température à l'intérieur du réacteur atteint une valeur maximale après 10 min de réaction ensuite elle diminue jusqu'à ce qu'elle se stabilise après environ 80 min de réaction.

## 3.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté principalement les résultats de simulation du fonctionnement d'un réacteur parfaitement agité continu non isotherme dans lequel se déroule une réaction complexe. A cet égard deux cas ont été considérés : le premier concerne la simulation en régime stationnaire et le deuxième concerne la simulation en régime dynamique.

Pour le cas de la simulation en régime stationnaire, une simulation a été effectuée pour déterminer les valeurs des concentrations des constituants, ainsi que le débit optimal qui assure la meilleure concentration du produit désiré E.

En ce qui concerne la simulation du réacteur en régime dynamique, nous avons trouvé :

- Lors de la mise en marche du réacteur, les différents variables d'état du réacteur tendent vers l'état intermédiaire avec une forte concentration du produit désiré E de  $39 \text{ mol/m}^3$ .
- Concernant la variation sur la température à l'entrée du réacteur, cette dernière n'affecte pas le comportement du réacteur. En effet, après un certain temps la température revient à sa valeur initiale.
- Pour une variation de 10% du débit d'entrée, une légère variation de la concentration du produit désiré (E) a été observé. Cette dernière se stabilise à ( $38,36$  et  $33 \text{ mol/m}^3$ ) après 40 min.
- Pour une variation de 30% du débit d'entrée, une variation assez considérable de la concentration du produit désiré (E) a été observé. Cette dernière se stabilise à ( $38, 31$  et  $25 \text{ mol/m}^3$  après ( $41, 33$  et  $28$  min) respectivement.
- Pour une variation de 40% du débit d'entrée, une variation très considérable de la concentration du produit désiré (E) a été observé. Cette dernière se stabilise à ( $38, 27$  et  $23 \text{ mol/m}^3$ ) après ( $50, 43$  et  $27$  min).
- Pour une variation de la concentration initiale du réactif A ( $C_{A0}$ ), une variation assez considérable sur l'évolution de la concentration de A ( $C_A$ ), et une variation sur l'évolution de la concentration de B ( $C_B$ ) et de E ( $C_E$ ), en effet plus la concentration de A augmenté, le réactif B se consomme plus rapidement. Dans ce cas, le produit désiré E se produit plus rapidement et atteint sa plus grande concentration de  $51 \text{ mol/m}^3$  pour une concentration de A de  $540 \text{ mol/m}^3$  après environ 40 min de réaction.
- Pour une variation de la concentration initiale du réactif B ( $C_{B0}$ ), une variation considérable sur l'évolution de la concentration de B ( $C_B$ ), et une variation sur l'évolution de la concentration de A ( $C_A$ ) et de E ( $C_E$ ), en effet plus la concentration de B augmenté, le réactif A se consomme plus rapidement. Dans ce cas, le produit désiré E se produit plus rapidement et atteint sa plus grande concentration de  $51 \text{ mol/m}^3$  pour une concentration de B de  $630 \text{ mol/m}^3$  après environ 40 min de réaction.

- Concernant la variation sur la température à l'entrée du réacteur, cette dernière n'affecte pas le comportement du réacteur. En effet, après changement de la température initiale  $T_0$  de 10 K, la température à l'intérieur du réacteur atteint une valeur maximale après 10 min de réaction ensuite elle diminue jusqu'à ce qu'elle se stabilise après environ 80 min de réaction.

# **CONCLUSION GÉNÉRALE**

## CONCLUSION GÉNÉRALE

Ce travail a consisté en l'étude par simulation, d'un réacteur parfaitement agité continu non isotherme dans lequel se déroule une réaction chimique complexe.

Cette étude est basée sur les modèles mathématiques décrivant le comportement du réacteur pour différents régimes de fonctionnement, à savoir le régime stationnaire et le régime dynamique.

Ainsi, dans le but de simulation, les systèmes d'équations constituant les différents modèles mathématiques. Nous avons résolu numériquement avec le logiciel de calcul scientifique Matlab (R2012 a) à l'aide des deux algorithmes préprogrammés qui sont le solveur ode45 et fsolve.

Après la résolution des différents modèles mathématiques, les principaux résultats obtenus sont résumés ci-dessous :

- Dans le cas de la simulation en régime stationnaire, nous avons procédé, à la détermination des concentrations à l'état stationnaire du fonctionnement du réacteur ( $C_{AS}= 398.8066 \text{ mol/m}^3$ ,  $C_{BS}=598.5023 \text{ mol/m}^3$ ,  $C_{CS}=0.9186 \text{ mol/m}^3$ ,  $C_{DS}=0.2455 \text{ mol/m}^3$  et  $C_{ES}=0.0294 \text{ mol/m}^3$ ) et la température 297.2862 K, ainsi, nous avons procédé à la détermination du débit optimal pouvant assurer la meilleure concentration du produit désiré E. A cet égard, un débit de  $0.1 \text{ m}^3/\text{min}$  conduit à une concentration du produit E de  $39 \text{ mol/m}^3$ . Cette valeur optimale de débit a été utilisée pour la simulation du fonctionnement du réacteur en régime dynamique.
- En ce qui concerne la simulation du fonctionnement du réacteur en régime dynamique :
  - Lors de la mise en marche du réacteur, les différents variables d'état du réacteur tendent vers l'état intermédiaire avec une forte concentration du produit désiré E de  $39 \text{ mol/m}^3$ .

- Concernant la variation sur la température à l'entrée du réacteur, cette dernière n'affecte pas le comportement du réacteur. En effet, après un certain temps la température revient à sa valeur initiale.
- Pour une variation de 10% du débit d'entrée, une légère variation de la concentration du produit désiré (E) a été observé. Cette dernière se stabilise à (38,36 36 et 33 mol/m<sup>3</sup>) après 40 min.
- Pour une variation de 30% du débit d'entrée, une variation assez considérable de la concentration du produit désiré (E) a été observé. Cette dernière se stabilise à (38, 31 et 25 mol/m<sup>3</sup> après (41, 33 et 28 min) respectivement.
- Pour une variation de 40% du débit d'entrée, une variation très considérable de la concentration du produit désiré (E) a été observé. Cette dernière se stabilise à (38, 27 et 23 mol/m<sup>3</sup>) après (50, 43 et 27 min).
- Pour une variation de la concentration initiale du réactif A ( $C_{A0}$ ), une variation assez considérable sur l'évolution de la concentration de A ( $C_A$ ), et une variation sur l'évolution de la concentration de B ( $C_B$ ) et de E ( $C_E$ ), en effet plus la concentration de A augmenté, le réactif B se consomme plus rapidement. Dans ce cas, le produit désiré E se produit plus rapidement et atteint sa plus grande concentration de 51 mol/m<sup>3</sup> pour une concentration de A de 540 mol/m<sup>3</sup> après environ 40 min de réaction.
- Pour une variation de la concentration initiale du réactif B ( $C_{B0}$ ), une variation considérable sur l'évolution de la concentration de B ( $C_B$ ), et une variation sur l'évolution de la concentration de A ( $C_A$ ) et de E ( $C_E$ ), en effet plus la concentration de B augmenté, le réactif A se consomme plus rapidement. Dans ce cas, le produit désiré E se produit plus rapidement et atteint sa plus grande concentration de 51 mol/m<sup>3</sup> pour une concentration de B de 630 mol/m<sup>3</sup> après environ 40 min de réaction.
- Concernant la variation sur la température à l'entrée du réacteur, cette dernière n'affecte pas le comportement du réacteur. En effet, après changement de la température initiale  $T_0$  de 10 K, la température à l'intérieur du réacteur atteint une

valeur maximale après 10 min de réaction ensuite elle diminue jusqu'à ce qu'elle se stabilise après environ 80 min de réaction.

Enfin nous souhaitons que ce travail soit appliqué sur une réaction chimique complexe spécifique.

## REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] M. MARGHSI, Modélisation et simulation d'un réacteur chimique tubulaire « Application à la polymérisation des oléfines ». Thèse de doctorat en science. Université Ferhat Abbas –Sétif-1, Algérie. 2013.
- [2] P. TRAMBOUZE, Réacteur Chimique : technologie, Technique de l'ingénieur, J4020, 1993.
- [3] S. MOKHTARI, Calcul d'un réacteur catalytique isotherme d'oxydation du SO<sub>2</sub> en SO<sub>3</sub> pour la production du H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>. Mémoire de Master. Université de Biskra, Algérie, Juin 2015.
- [4] J. VILLERMAUX, Réacteur Chimique : principes, Technique de l'ingénieur J4010, 1994.
- [5] P. TRAMBOUZE, et EUZEN, Jean-Paul. Les réacteurs chimiques : de la conception à la mise en œuvre. Publications de l'institut français du pétrole.
- [6] E. KOLLER, Aide-mémoire de génie chimique, Génie chimique 2ème édition, paris 2001.
- [7] P. BENEDEK ; A. LASZLO, Les bases scientifiques du génie chimique, Hongrie, 1972.
- [8] J. VILLERMAUX. "Réacteurs chimiques : Principes". Techniques de l'ingénieur. Génie des procédés J4010, 1996.
- [9] A. BELLIL, optimisation d'un réacteur de production de l'ammoniaque. Mémoire de Master. Université Mohamed Khider – Biskra, Algérie. Juin 2015.
- [10] E. KOLLER, Aide-mémoire de génie chimique-3ème édition. Dunod, 2010.
- [11] M. BENAMIRA. Cinétique Chimique, Cours pour Master 2 Chimie des Matériaux. Université de JIJEL.
- [12] J. VILLERMAUX, Génie de la réaction chimique : conception et fonctionnement des réacteurs. Tec-Doc Lavoisier, 1982.
- [13] HORÁK, Josef et PAŠEK, Josef. Conception des réacteurs chimiques industriels sur la base des données de laboratoire. Eyrolles, 1981.



- [14] P. Arnaud, Cours de chimie physique © BORDAS, Paris, 1988.
- [15] M. LEMOUARI, Cours Modélisation et optimisation des procédés. Département Génie des procédés. Université Abderrahmane Mira Bejaia, Algérie, 2022.
- [16] N.A. Amenaghawon et K.O. obahiagbon, computer simulation of complex reactions in a non-isothermal continuous stirred tank reactor, *Advances in Agriculture, Sciences and Engineering Research 2* (2012), 318 – 327.

# ANNEXES

## Script 1 : Simulation du réacteur à l'état stationnaire

```
function y=stationnaire(C)
%C(1)=CA
%C(2)=CB
%C(3)=C
%C(4)=CD
%C(5)=CE
%C(6)=T
%global f v k1 k2 k3
f=6; v=1; k1=0.00003; k2=0.003; k3=0.0012;
y(1)=(f/v)*(400-C(1))-(k1*C(1)*C(2));
y(2)=(f/v)*(600-C(2))-(k1*C(1)*C(2))-(k2*C(2)*C(3))-(k3*C(2)*C(4));
y(3)=(f/v)*(0-C(3))+(k1*C(1)*C(2))-(k2*C(2)*C(3));
y(4)=(f/v)*(0-C(4))+(k2*C(2)*C(3))-(k3*C(2)*C(4));
y(5)=(f/v)*(0-C(5))+(k3*C(2)*C(4));
y(6)=( (f/v)*((400*75.25)+(600*175.30)*(297-C(6)))+(0.0417*0.0177*(C(6)-
302)))-
C(6)*(y(1)*75.25+y(2)*175.30+y(3)*78.20+y(4)*103.80+y(5)*100.21);)/
(C(1)*75.25)+(C(2)*175.30)+(C(3)*78.20)+(C(4)*103.80)+(C(5)*100.21);
y=y';
end
```

---

## Résolution numérique

```
>> global k1 k2 k3 v f
>> f=6; v=1; k1=0.00003; k2=0.003; k3=0.0012;
>> C0=[400 600 0 0 0 297];
>> [C]=fsolve('stationnaire',C0)
```

---

## Script 2 : Simulation du réacteur à l'état dynamique

```
Function dydt= cstr_17(t,C)
%C(1)=CA
%C(2)=CB
%C(3)=CC
%C(4)=CD
%C(5)=CE
%C(6)=T
%global f v k1 k2 k3
v=1; k1=0.00003; k2=0.003; k3=0.0012; Ti=297; f=0.1;
dydt(1)=(f/v)*(400-C(1))-(k1*C(1)*C(2));
dydt(2)=(f/v)*(600-C(2))-(k1*C(1)*C(2))-(k2*C(2)*C(3))-(k3*C(2)*C(4));
dydt(3)=-(f/v)*(C(3))+(k1*C(1)*C(2))-(k2*C(2)*C(3));
dydt(4)=-(f/v)*(C(4))+(k2*C(2)*C(3))-(k3*C(2)*C(4));
dydt(5)=-(f/v)*(C(5))+(k3*C(2)*C(4));
dydt(6)= y(6)=( (f/v)*((400*75.25)+(600*175.30)*(297-
C(6)))+(0.0417*0.0177*(C(6)-302)))-
C(6)*(y(1)*75.25+y(2)*175.30+y(3)*78.20+y(4)*103.80+y(5)*100.21);)/
(C(1)*75.25)+(C(2)*175.30)+(C(3)*78.20)+(C(4)*103.80)+(C(5)*100.21);
dydt=dydt';
end
```

---

## Résolution numérique

```
>> global k1 k2 k3 v f
>> f=0.1; v=1; k1=0.00003; k2=0.003; k3=0.0012;
>>tspan=[0 100];
>> C0=[400 600 0 0 0 297];
>>[t,C]=ode45('cstr_17',tspan,C0);
>>plot(t,C(:,1),'b',t,C(:,2),'r')
>>grid on
>>xlabel('Temps(min)')
>>ylabel('Concentration des réactifs (mol/m^3)')
>>legend('Concentration de A', 'Concentration de B')
```

---

## **Résumé**

Ce travail consiste en l'étude, par simulation, d'un réacteur parfaitement agité continu non isotherme, dans lequel se déroule une réaction chimique complexe.

En effet, la simulation du réacteur est basée sur les modèles mathématiques décrivant son comportement pour le régime stationnaire et le régime dynamique. A cet égard, le modèle mathématique du réacteur est résolu numériquement en utilisant le logiciel de calcul scientifique MATLAB (R2012a) grâce au solveur ODE45 pour le régime dynamique et FSOLVE pour le régime stationnaire.

Les principaux résultats obtenus concernent le fonctionnement du réacteur en régime stationnaire et en régime dynamique. Dans le cas du régime stationnaire, le point de fonctionnement a été déterminé. En ce qui concerne le cas du régime dynamique, un débit optimal de  $0.1 \text{ m}^3/\text{min}$  a été utilisé. L'effet des concentrations initiales des réactifs, ainsi que le débit à l'entrée du réacteur sur la concentration du produit désiré a été étudié. Aussi, l'effet de la température initiale sur le comportement du réacteur a été considérée.

**Mots clés :** Simulation, Réacteur chimique, Réaction complexe, Matlab.

## **Abstract**

This work consist of the study, by simulation, of a perfectly stirred continuous non isothermal reactor, in which a complex chemical reaction takes place.

Indeed, the simulation of the reactor is based on mathematical models describing its behavior for the stationnary regime and the dynamic regime. In this respect, the mathematical model of the reactor is solved numerically using the scientific calculation software MATLAB (R2012a) thanks to the solver ODE45 for the dynamic regime and Fsolve for the stationnary regime.

The main results obtained relate to the operation of the reactor in steady state and in dynamic state. In the case of steady state, the operating point has been determined. Regarding the case of the dynamic regime, an optimal flow rate of  $0.1 \text{ m}^3/\text{min}$  was used. The effect of the initial concentrations of the reactants, as well as the flow rate at the inlet of the reactor on the concentration of the desired product was studied. Also the effect initial temperature on the behavior of the reactor was considered.