UNIVERSITÉ KASDI MERBAH OUARGLA
Faculté des Sciences Appliquées
Département de Génie des Procédés

Mémoire de Master Académique

Domaine : Sciences et Technologie
Filière : Génie des procédés
Spécialité : Génie Chimique

Présenté par :

Meftah Akram **Labchek Mohammed Amine**

Thème

Modélisation du comportement thermique d'un réacteur parfaitement agité lors de la mise en œuvre de la réaction exothermique.

Soutenu publiquement le :20/06/2019 devant le jury :

Mr : SEKIRIFA Mohammed Lamine	Président UKM-Ouargla
Mr : CHENNOUF Nasreddine	Examinatreur UKM-Ouargla
Mr : LATI Mokhtar	Examinatreur UKM-Ouargla
Pr : DOUNIT Salah	Encadreur UKM-Ouargla

Année Universitaire : 2018 / 2019

REMERCÎMENT

Nous remercions "ALLAH" le tout puissant de nous avoir donné le courage, la volonté et la patience pour terminer ce mémoire.

Ce travail a été réalisé au laboratoire de Génie des Procédés de l'Université Kasdi Merbah de Ouargla, sous la direction de monsieur DOUNIT Salah, Professeur au département de Génie des Procédés. Nous lui exprimons particulièrement toute notre reconnaissance pour son suivi et pour son énorme soutien, qu'il na cessé de nous prodiguer tout au long de la période du projet , de nous avoir fait bénéficier de ses compétences scientifiques et sa constante disponibilité tout le long du travail.

Nous remercions aussi Monsieur SEKIRIFA Mohammed Lamine pour l'honneur d'accepté de présider notre jury de mémoire. Nous adressons tous nos remercîments à Monsieur, CHENNOUF Nasredine, ainsi que Monsieur, LATI Mokhtar, enseignants au département de génie des Procédés, pour avoir accepté de juger ce travail et de participer à notre jury de soutenance .

Un grand merci Pour toute personne ayant contribuée de près ou de loin à la réalisation de ce travail.

Sans oublier nos familles et amis qui nous ont aidé tant moralement que matériellement.

Enfin que les amis, frères et sœurs dont les noms ne sont pas cités ne nous tiennent pas rigueur, nos pensées vont aussi vers eux.

A nos parents

Nos frères et sœurs

Nos amis

Résumé

L'objectif de ce travail est l'étude du comportement dynamique d'un réacteur parfaitement agité lors de la mise en œuvre d'une réaction exothermique. Cette étude a été réalisée par une modélisation sur Excel. L'idée consiste à établir ensuite à résoudre les bilans de matière et les bilans enthalpique sous forme d'équations différentielles en régimes transitoire et en régime permanent. Ce type d'étude permet d'avoir une idée générale sur la stabilité du réacteur parfaitement agité et la variation du taux de conversion. A travers l'étude paramétrique, nous avons trouvé qu'une élévation de la température d'entrée des réactifs permet d'améliorer le taux de conversion mais la température du réacteur est plus importante. Cela entraine des risques sur l'installation. La réduction de la température du fluide frigorifique permet de réduire la température du réacteur mais le taux de conversion est baisé. Enfin, les calculs ont montré que le pas de calcul doit être choisi inférieur à 0,2 pour obtenir des résultats corrects. Autrement, la méthode de calcul diverge et les résultats sont complètement aberrants.

Mots clés: réacteur agité, taux de conversion, modélisation, réaction exothermique.

Abstract

The objectif of this work is to study the dynamic behavior of a perfectly agitated reactor during the implementation of an exothermic reaction. this study was carried out by Excel Modeling. the idea is then to solve the material and enthalpy balances in the form of differential equations in transient and study-state conditions. this type of study provides general idea of the stability of the perfectly agitated reactor (CSTR), and variation in the conversion rate. Through the parametric study we found the a rise in the region inlet temperatur improves the conversion rate but the reactor temperatur is higher this leads to risks on the installation. reducing the temperature of the refrigirent reduces the reactor temperatur, but the conversion rate is lower. finally, calculations showed that the calculation step must be showsen lower than 0.2 to obtain correct results. otherwise the calculation method diverges and results are completely out liers.

Keywords: stirred tank reactor, conversion rate, modeling, exothermic reaction.

ملخص

الهدف من هذا العمل هو دراسة السلوك الديناميكي لمفاعل كيميائي أثناء تنفيذ تفاعل طارد للحرارة , و قد أجريت هذه الدراسة من خلال برنامج EXCEL , تتمثل الفكرة في إنشاء توازن مادي وتوازن حراري في شكل معادلات تفاضلية في أوضاع الحالة المؤقتة والثابتة,تمكننا هذه الدراسة من إعطائنا فكرة عامة عن توازن و ثبات الأداء المفاعل وتغير معدل التحويل, من خلال دراسة عميقة , استنتجنا أن ارتفاع درجة حرارة المتفاعلات يؤدِي إلى تحسن مردود المفاعل و لكن يؤدي إلى ارتفاع درجة هذا الأخير ,و هذا يؤدي إلى مخاطر في تجهيزات المفاعل , إن تقليل درجة حرارة المبرد يقلل من درجة حرارة المفاعل لكن معدل التحويل يكون منخفضا , أخيرا أظهرت الحسابات أنه يجب علينا اختيار خطوة الحساب أقل من 0.2 للحصول على نتائج صحية و دقيقة . خلاف ذلك، فإن طريقة الحساب تتباعد والنتائج تفوق تماما.

الكلمات المفتاحية : مفاعل ممزوج, النمذجة، تفاعل طارد للحرارة.

SOMMAIRE

Sommaire II

Liste des tableaux IV

Liste des figures V

Introduction générale. 6

Chapitre I: Les réacteurs chimiques 8

I. Notions générales sur les réacteurs chimiques : 9

I.1 Classification des reacteurs. 10

I.1.1 Classification selon la nature des phases en présence. 10

I.1.2 Classification selon le mode de fonctionnement. 11

I.1.3 Classification selon l'aspect thermique: 12

I.1.4 classification selon la geometrie et le mode d'ecoulement du réacteur. 13

II. Les bilans de matiere et les bilans energetiques. 15

établissement des bilans enthalpiques: 16

III. Choix d'un réacteur. 16

IV. LE PROPYLENE GLYCOL. 18

a) stœchiométrie: 18

b) Production: 19

c) Utilisations: 19

Chapitre II: modelisation numeriques 20

I. Introduction: 21

I.1 Utilisation: 21

I.2 Le logiciel Microsoft Excel: 21

II. Les bilans de matière et le bilan énergétique. 21

1) Bilans de matière en régime permanent 21

2) Bilans de matière en régime transitoire. 22

3) Bilan de chaleur régime transitoire. 23

4) Bilan de chaleur régime permanent. 24

III. Méthodes numériques utilisées: 25

III 1. l'approche numérique: 25

III 2. Méthode d'Euler: 25

III 3. Les méthodes de Runge et Kutta : 26

a) Runge_kutta d'ordre 2: 29

b) Runge Kutta d'ordre 4: 29
Chapitre III: resultats et discussionS 31
I. Production de Propylène Glycol dans un RCPA avec refroidissement externe : Objectif de l'étude. 32
II. Caractéristiques du réacteur et conditions opératoires. 32
III. Présentation d'une simulation type. 34
III 1. Régime permanent: 34
a. La chaleur de la réaction à une température T : 34
b. Les stœchiométries ; 35
c. Evaluation des termes de bilan de matière : 35
d. Evaluation des termes de bilan de chaleur : 36
III 2. Régime transitoire : 38
a. Évaluation des thermes réactionnels : 38
b. Les stœchiométries: 38
c. evaluation des termes de bilan de matiere : 39
d. Evaluation des termes du bilan de chaleur : 39
IV. EFFET DES PARAMÈTRES OPÉRATOIRES. 42
IV. 1. L'influence de la température de l'entrée des fluides: 42
IV. 2. Influence de la température du fluide frigorifique. 44
IV. 3. Influence du pas de calcul sur la stabilité du réacteur. 46
CONCLUSION GENERALE 48
REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUE: 49

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 1 : Classification des réacteurs indication d'exemples rencontrés en raffinage ou en petro chimie...... 10
Tableau 2 : Proprietés chimiques du propylene glycol..... 18
Tableau 3 : Paramètres du réacteur et de la cinétique réactionnelle. 32
Tableau 4 : Propriétés thermodynamiquesdes espèces..... 33
Tableau 5 : Résultats du calcule 37
Tableau 6 : L'evolution de la température de réacteur en fonction de la température de la paroi..... 45

LISTE DES FIGURES

Figure 1 : Facteurs Gouvernant Le Fonctionnement d'un Réacteur Chimique [4]. 10
Figure 2 : Ecoulement à travers un récipient parfaitement agite (réacteur à cuve parfaitement agitée) [4] 14
Figure 3 : Formule CHIMIQUE DU propylene glycol. 18
Figure 4 : Méthode de rectangle à gauche..... 27
Figure 5 : Méthode de rectangle à droite 27
Figure 6 : Méthode de trapèze 29
Figure 7 : Schéma d'un CSTR avec double enveloppe de refroidissement. 33
Figure 8 : La convertion XMB et XEB en fonction de la température 37
Figure 9 : Concentration du réactif principal (oxyde de propylène) et du produit (propylène glycol) en fonction du temps..... 40
Figure 10 : Concentration de l'eau en fonction du temps 40
Figure 11 : Température de sortie en fonction du temps. 41
Figure 12 : Concentration de réactif et produit en fonction du temps 42
Figure 13 : Concentration de l'eau en fonction du temps. 43
Figure 14 : La température de sortie en fonction du temps 43
Figure 15 : Concentration de réactif et produits en fonction du temps 44
Figure 16 : Concentration de l'eau en fonction du temps. 44
Figure 17 : La température de sortie en fonction du temps. 45
Figure 18 : Concentration de réactif et produits en fonction du temps 46
Figure 19 : Concentration de l'eau en fonction du temps 46
Figure 20 : La température de sortie en fonction du temps. 47

Les réacteurs chimiques sont des objets incontournables dans l'industrie chimique et aux laboratoires, cela reviens à leur importance crucial dans ce domaine. Ce sont des appareils conçus pour des réactions chimiques, qui ont pour but de transformer des espèces en d'autres espèces avec des caractéristiques et propriétés différentes.

Plusieurs problèmes dans l'ingénierie et la science peuvent être résolus aux termes d'équations différentielles. Une équation différentielle est une équation où l'inconnue est une fonction, et qui se présente sous la forme d'une relation entre cette fonction et ses dérivées.

L'étude présentée dans ce mémoire, s'inscrit dans le cadre de la modélisation du comportement thermique d'un réacteur parfaitement agité lors de la mise en œuvre de la réaction de synthèse du propylène glycol par hydrolyse de l'oxyde de propylène. L'idée consiste à concevoir un programme de calcul qui a pour objectif de prédire le comportement thermique du réacteur sans avoir recours à des mesures réelles. L'aspect thermique a une influence importante sur le system réactionnel. En d'autres termes, il influe directement sur la performance du réacteur chimique. Le propylène glycol $(CH_3 - CHOH - CH_2OH)$ est une composition chimique à multiples usages. Dénommé 1,2 diol ou dihydroxypropane ou encore methylglycole, il fait partie des compositions chimiques des groupes hydroxyle à forme géminale ou vicinale (c'est dire composition à deux ou plusieurs atomes collés avec un autre similaire).

Dans ce contexte, l'objectif de cette étude théorique est de répondre à ces deux questions:

-Où peuvent on trouver les régimes stationnaire dans le système et quand ils seront stables ?

- Quelle est la/ les méthodes qu'on doit suivre pour atteindre notre objectif ?

Pour répondre à ces questions, on a eu recours à la modélisation, qui est un outil très important de nos jours pour résoudre des problèmes industriels, et cela nous a poussés à exploiter les différentes méthodes numériques, puis les appliquer.

Le présent manuscrit est devisé en trois parties. Après cette introduction, le premier chapitre présente un état de l'art sur les types des réacteurs chimiques et leur fonctionnement ainsi que des éléments de théorie sur l'influence de l’aspect thermique sur ces derniers. Dans le deuxième chapitre, le système réactionnel modélisé est présenté en détail et les bilans de matières et les bilans thermiques sont établis. Les méthodes numériques utilisées dans la modélisation et la démarche méthodologique sont également exposées. Enfin, dans le dernier chapitre, l'analyse et la discussion des résultats trouvés sont présentés. À la fin de ce document une conclusion générale est présentée.

CHAPITRE I:
LES RÉACTEURS CHIMIQUES

I. NOTIONS GENERALES SUR LES REACTEURS CHIMIQUES :

Les réacteurs chimiques revêtent une importance tant sur le plan industriel qu'à celui du laboratoire. En effet, les réacteurs agités en continu ont une place non négligeable dans ce domaine. Ces derniers se divisent en deux catégories selon la prédominance des phénomènes mis en jeux : les phénomènes à dominante hydrodynamique (écoulement monophasique ou poly-phasique, création et suppression d'interface entre phases, etc.), et les phénomènes physiques à dominante cinétique relevant de la science des transferts. Ces derniers se produisant soit à l'intérieur d'une phase (homogénéisation des concentrations et des températures), soit entre phases (dissolution d'un gaz dans un liquide) [1].

En général, le réacteur ne représente pas la plus grosse part de l'investissement dans un procédé industriel. Pourtant, ses caractéristiques de fonctionnement conditionnent en grande partie les installations placées en amont (préparation des charges de réactif, choix des conditions de température et de pression) et les dispositifs placés en aval (dispositifs de séparation des produits notamment). Une amélioration de quelques points de rendement du réacteur peut donc se traduire par un abaissement notable des coûts d'investissement et de production. En ce sens, on peut dire que le réacteur est véritablement le cœur du procédé, qui requiert toute l'attention de l'ingénieur [2].

Ainsi, le réacteur est choisi à partir des caractéristiques suivantes:

1. Les facteurs chimiques (cinétique de la réaction) : La conception doit fournir un temps de séjour suffisant pour que la réaction désirée se déroule au degré de conversion requis
2. Les facteurs de transfert de matière : dans les réactions hétérogènes, la vitesse de la réaction peut être contrôlée par la vitesse de diffusion des réactifs, plutôt que par la cinétique chimique.
3. Les facteurs de transfert de chaleur : réactions exothermiques, endothermiques...
4. Les facteurs de sécurité : confinement des réactifs et produits dangereux, et le contrôle de la réaction et les conditions du procédé.

(La figure 1) indique, sous forme d'un schéma systémique, les principaux facteurs gouvernant le fonctionnement d'un réacteur chimique. En effet, toute analyse systématique du fonctionnement de ces réacteurs ne pourra être faite qu'après les avoir classés en un certain nombre de types bien caractérisés [2]. L'objet du génie de la réaction chimique est d'étudier les interactions entre ces facteurs.

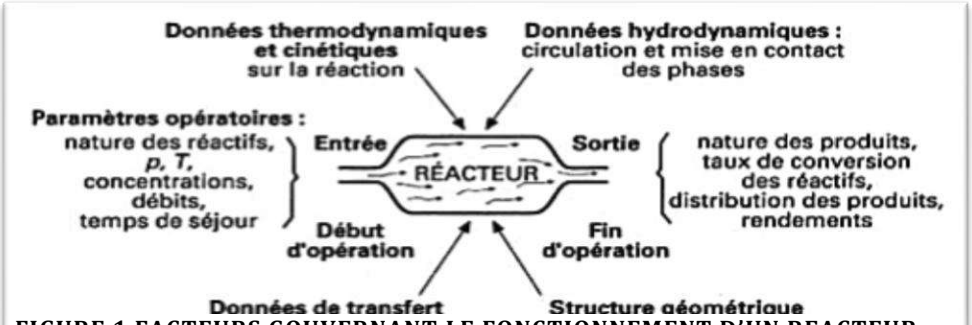


FIGURE 1 FACTEURS GOUVERNANT LE FONCTIONNEMENT D'UN REACTEUR CHIMIQUE [4].

I.1 CLASSIFICATION DES REACTEURS.

A partir des critères évoqués ci-dessus, il est possible de dresser une classification des divers réacteurs(tableau. 1).

Tableau.1 Classification des réacteurs indication d'exemples rencontrés en raffinage ou en petro chimie [4].

Phases en présence	Tubulaire	Étagé	Parfaitement agité
Gaz	Vapocraquage		
Liquide	Viscoréduction	Dimérisation d'oléfines	
Gaz + liquide	Procédé Clauspol	Absorption dans colonnes à plateaux	
Liquide + liquide	Alkylation HF	Alkylation sulfurique	
Gaz + catalyseur	Reformage à la vapeur	Reformage catalytique	Craquage catalytique
Gaz + liquide + catalyseur	Hydrotraitement	Hydrotraitement	Hydrotraitement

I.1.1 Classification selon la nature des phases en présence.

Il est possible d'établir la classification ci-dessous en considérant ce critère.

a) systèmes monophasiques (homogènes).

Les réacteurs homogènes sont ceux dans lesquels le milieu réactionnel est constitué par une phase gazeuse ou une phase liquide.

b) systèmes poly-phasiques (hétérogènes).

Dans un réacteur hétérogène, on peut croiser deux ou plusieurs phases, où les transferts de matières entre les phases apparaissent et peuvent être des facteurs clés conditionnant l'avancement de la réaction chimique. Dans un certain nombre de cas, on pourra regrouper la phase gazeuse et la phase liquide sous le vocable commun de phase fluide, et ceci que l'on soit en présence d'un système monophasique ou poly-phasique [4].Les réacteurs poly-phasiques peuvent ainsi être des réacteurs fluide – fluide ou des réacteurs fluide – solide. Dans ce dernier cas, on sera amené à faire la distinction entre les cas où le solide mis en jeu sert de catalyseur et n'est pas consommé par la réaction, et ceux ou les solides présents prennent part à la transformation et sont de ce fait soit des réactifs, soit des produits de transformation.

Comme les réactions catalytiques revêt une importance capitale dans la majorité des procédés de transformation et de fabrication des objets de notre vie quotidienne, examinons les principales façons d'employer ces catalyseurs. Dans la pratique, ils sont employés sous forme de grains de petites tailles disposées de façons multiples dans le réacteur. On distingue ainsi :

1. un lit fixe, si les grains de catalyseur entassés les uns sur les autres forment un empilement immobile, dans les interstices duquel circule le ou les fluides réactionnels.
2. un lit mobile, si l'empilement réalisé est soumis à une translation généralement verticale. L'ensemble du lit se déplaçant sous l'influence de la force de pesanteur.
3. un lit fluidisé, dans lequel des grains de catalyseur sont maintenus en suspension agitée par un courant ascendant de fluide réactionnel.
4. un lit entrainé, où fluide et particules sont entrainés dans la même direction et traversent ainsi la zone réactionnelle.
5. une suspension de solide catalytique immergé dans le fluide réactionnel liquide.

Il est à noter que la classification des réacteurs ne se limite pas seulement à la nature des phases. Parmi les critères de classification il y a aussi les points cités ci-dessous.

I.1.2 CLASSIFICATION SELON LE MODE DE FONCTIONNEMENT.

a) En 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. Après mise en conditions de température et de pression, la réaction se déroule jusqu'au taux de transformation désiré.

Ce type d'appareil à la faveur des industriels pour les opérations jugées très délicates et les petites productions.

Parmi les réacteurs discontinus en trouve les autoclaves. Ce sont des cuves en acier munies d'un couvercle et d'un dispositif de fermeture étanche, prévues pour travailler sous fortes pression. Ce couvercle particulier permet en outre l'observation de ce qui se passe dans le réacteur grâce à des hublots, et il compte un certain nombre de dispositifs permettant de faire passer la tige d'un agitateur, un thermocouple, une soupape de sécurité, un manomètre et des tuyaux d'alimentation et de soutirage des produits. Le chauffage est généralement obtenu par de la vapeur qui circule dans une double enveloppe, mais on peut aussi utiliser des résistances électriques, de l'eau chaude ou encore des gaz chauds.

Bien adaptés pour réaliser une réaction en phase liquide, ces appareils conviennent aux fabrications de faible tonnage, aux installations passe partout qui travaillent par campagne pour élaborer différents produits, aux réactions complexes mettant en œuvre des produits chers ou corrosifs à une température élevée. Le temps de séjour est supérieur à une heure.

b) En continue:

Les appareillages continus, qualifiés de systèmes ouverts, sont semblables aux systèmes fermés dans leurs conceptions et en plus ils sont dotés d'une ou de plusieurs entrées pour introduire les réactifs et d'une ou plusieurs sorties par lesquelles les produits de la transformation sont évacués [4].

Une variation 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 [3].

I.1.3 CLASSIFICATION SELON L'ASPECT THERMIQUE:

Cette classification est fondée sur tout ce qui concerne la chaleur au cours de la réaction. Lorsque cette quantité reste dans le mélange réagissant et il n ya aucun échange de chaleur avec l'environnement, le réacteur est alors appelé adiabatique. Si d'autre part, il existe un échange avec l'environnement de telle sorte que la température à l'intérieur du réacteur est constante, on parle de réacteur isotherme. On peut résumer les différentes situations comme suit :

1. domaine adiabatique : Température variable : la circulation de la chaleur tend vers zéro.
2. domaine polytrope (polythermique) : Température variable :il existe une circulation de chaleur.

3. domaine isotherme :Température constante : la circulation de chaleur tend vers la chaleur de réaction [4].

a) Réacteurs adiabatiques:

Le réacteur adiabatique, souvent rencontré industriellement, constitue un cas particulier du cas général correspond à une surface d'échange nulle. On peut noter que des différenciations d'apparence, ont assez souvent pour origine la localisation de la surface d'échange thermique. En effet, on peut réaliser l'échange thermique :

- à l'intérieur du réacteur ;
- à travers les parois du réacteur ;
- à l'extérieur du réacteur.

b) Réacteurs isothermes.

Dans un réacteur isotherme, la quantité de la chaleur mise en circulation est transmise par échange au milieu environnant de façon que la température des matières régissantes reste constante. Si la réaction est exothermique, la chaleur dégagée dans le réacteur est transmise au milieu environnant; par contre, dans le cas d'une réaction endothermique la situation est inversée, on chauffe le réacteur de l'extérieur pour compenser la chaleur absorbé par la réaction. Concernant les réacteurs isothermes, il faut les construire de telle manière que l'échange de chaleur soit le plus favorable possible. Pour qu'un échange de chaleur puisse se produire, il faut que la température du réacteur soit supérieure à celle du milieu environnant. C'est cette différence de température ΔT qui est relativement faible, qui caractérise les réacteurs isothermes [12].

c) Réacteurs poly-thermiques:

Dans les réacteurs poly-thermiques, la chaleur de réaction n'est compensée qu'en partie par évacuation de chaleur ou bien par des processus à effet thermique de signe contraire à celui du processus principal. Le régime poly-thermique est caractéristique de nombreux fours verticaux : hauts fourneaux, fours à chaux, etc., de la plupart des tours à garnissage destinées à l'absorption ou à la désorption[12].

I.1.4 CLASSIFICATION SELON LA GEOMETRIE ET LE MODE D'ECOULEMENT DU REACTEUR.

Dans une opération continue, on considère que, à l'intérieur du réacteur, le mouvement des diverses phases de leur point d'entrée à leurs points de sortie peut revêtir diverses formes qui dépendent

évidemment de la structure de l'appareillage, pour faciliter la catéchisation des phénomènes physiques en milieu monophasique [1].

a) Réacteurs parfaitement agités.

Les réacteurs parfaitement agités sont de simples récipients cylindriques munis d'un dispositif d'agitation interne efficace. Dans ce cas, le réactif entrant dans le réacteur se trouve brusquement plongé dans un 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].

b) Réacteurs tubulaires.

Ce sont les plus utilisés dans le domaine industriel. Ils permentent de realiser les reactions en phase gazeuse à une temperatures très élevées.L'écoulement de type piston est réalisé lorsque l'on fait

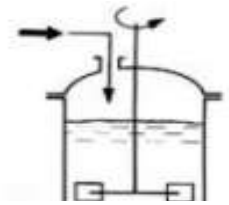


FIGURE 2Ecoulement à travers un récipient parfaitement agite (réacteur à cuve parfaitement agitée) [4]

circuler à grande vitesse un fluide peu visqueux dans un tube, l'espèce chimique se transforme progressivement tout au long du tube avec un prfile continu et décroissant de concentration du réactif considéré entre l'entrée et la sortie du réacteur.Ce profil de concentration décroissant du réactif permet de qualifier cet appareil de réacteur à gradient de concentration [6].

c) **Réacteur étagé.**

Les caractéristiques du réacteur étagé se situent entre le réacteur à gradient et le réacteur parfaitement agité. Leur comportement est intermédiaire entre celui de deux réacteurs idéaux : réacteur parfaitement agité et réacteur piston qui correspondent à des conditions hydrodynamiques extrêmes [6].

II. LES BILANS DE MATIERE ET LES BILANS ENERGETIQUES.

il est très important d'établir les bilans de matière et énergitiques des racteurs, par ce qu'ils relient la composition du mélange réactionnel, les flux de matière entrant et sortant du réacteur, et les débits de transformation chimique dont le réacteur est le siège.

Dans une phase donnée, chaque espèce obéit à une équation de bilan de masse. Le bilan s'écrit au moyen de quantité ou de débits mesurés en moles, masse, nombre d'atomes, etc. la forme générale se présente comme suit :

$$\left\{\begin{array}{c}\text{Débit}\\ \text{de matière}\\ \text{entrant}\end{array}\right\} + \left\{\begin{array}{c}\text{Débit}\\ \text{de production}\\ \text{net}\end{array}\right\} = \left\{\begin{array}{c}\text{Débit}\\ \text{de matière}\\ \text{sortant}\end{array}\right\} + \left\{\begin{array}{c}\text{Débit}\\ \text{d'accumulatio}\\ \text{n}\end{array}\right\}$$

Les premier et troisième termes sont des débits de matière. Le second terme traduit le rôle des réactions chimiques. Le débit de production net est la différence entre le débit de production et le débit de destruction par ces réactions. Enfin, le quatrième terme traduit l'évolution dans le temps.

Deux situations fréquentes méritent l'attention :

- le réacteur ouvert en régime permanent : L'état de ce réacteur est supposé indépendant du temps c'est-à-dire que rien ne s'accumule. On dit qu'il est en régime établi on continu. Le bilan est réduit à :

$$\left\{\begin{array}{c}\text{Débit}\\ \text{de matière}\\ \text{entrant}\end{array}\right\} + \left\{\begin{array}{c}\text{Débit}\\ \text{de matière}\\ \text{sortant}\end{array}\right\} = \left\{\begin{array}{c}\text{Débit}\\ \text{de production}\\ \text{net}\end{array}\right\}$$

- le réacteur fermé : il y a ni débit d'entrée ni débit de sortie. Le bilan se traduit par :

$$\left\{\begin{array}{c}\text{Débit}\\ \text{de}\\ \text{production}\\ \text{net}\end{array}\right\} = \left\{\begin{array}{c}\text{Débit}\\ \text{d'accumulation}\end{array}\right\}$$

ÉTABLISSEMENT DES BILANS ENTHALPIQUES:

Nous avons vu que, dans les processus industriels, les opérations se déroulent généralement en continu, c'est à dire en système ouvert. L'enthalpie est une grandeur conservative, et les termes de génération et de consomation disparaissant, pour devenir:

$$\left\{\begin{array}{c}\text{Accumulation}\\ \text{dans le}\\ \text{volume}\\ \text{de contrôle}\end{array}\right\} = \left\{\begin{array}{c}\text{Transport}\\ \text{entrant par la}\\ \text{surface}\end{array}\right\} - \left\{\begin{array}{c}\text{Transport}\\ \text{sortant par la}\\ \text{surface}\end{array}\right\} + \left\{\begin{array}{c}\text{Transfert à}\\ \text{la surface}\end{array}\right\}$$

Si l'on fait l'hypothèse que le régime est permanent, ce qui est le plus souvent le cas, il n'y a pas d'accumulation nette dans le volume de contrôle, et cette équation se résume à :

$$\left\{\begin{array}{c}\text{Transport}\\ \text{entrant par la}\\ \text{surface}\end{array}\right\} - \left\{\begin{array}{c}\text{Transport}\\ \text{sortant par la}\\ \text{surface}\end{array}\right\} + \left\{\begin{array}{c}\text{Transfert à}\\ \text{la surface}\end{array}\right\} = 0$$

III. CHOIX D'UN RÉACTEUR.

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

- Le taux de conversion d'un réactif donné.
- Le rendement en produit cherché, c'est-à-dire la sélectivité dans le cas très fréquent ou la réaction cherchée est accompagnée d'une ou de plusieurs réactions parasites; la recherche de cette sélectivité peut en effet amener à se contenter d'un faible taux de conversion, surtout si les réactifs sont faciles à isoler des produits de la réaction en vue de leur recyclage.
- La minimisation de la formation d'une impureté très difficile à séparer, ou susceptible de créer des problèmes (pour la sécurité, l'environnement, sa destruction, …etc.)

- La minimisation du volume global, autrement dit la maximisation de la capacité de production, ou la minimisation des investissements.
- La sécurité de fonctionnement.
- Le tonnage demandé, un fort tonnage favorisant le choix d'un réacteur fonctionnant en continu, et vice-versa.
- La qualité du produit obtenu.

Sans oublier d'autres facteurs, notamment :

- De la nature des réactifs et des produits de la réaction. Le réacteur ne peut en effet être le même selon qu'il s'agit d'une réaction en milieu homogène entre gaz ou entre liquides, ou d'une réaction entre deux phases liquides, entre un gaz et un liquide, entre des liquides mais avec production d'un gaz, entre des solides fondus, …etc.
- De la gamme de température et de pression à l'intérieur de laquelle la réaction se déroule.
- De la quantité de chaleur mise en jeu dans la transformation. Cette dernière peut être endothermique, athermique ou exothermique. On doit remarquer à ce propos, à titre d'exemple, qu'une réaction rapide et fortement exothermique orientera sur un réacteur en continu, même si les tonnages sont relativement modestes, et que la conception du réacteur sera influencée par l'intérêt qu'il y a utiliser la chaleur produit, ou une partie de celle-ci, pour amener les réactifs la température de la réaction. De plus, le choix d'un réacteur peut influencer fortement les grandeurs auxquelles on veut accorder une priorité : taux de conversion, sélectivité, volume et coût des appareils [7].

IV. LE PROPYLENE GLYCOL.

(La figure 3). Représente la formule chimique du propylène glycol, énantiomères (R) _ (-) à gauche et (S) _ (+) à droite et (le tableau 2.) regroupe quelques-unes de ses propriétés.

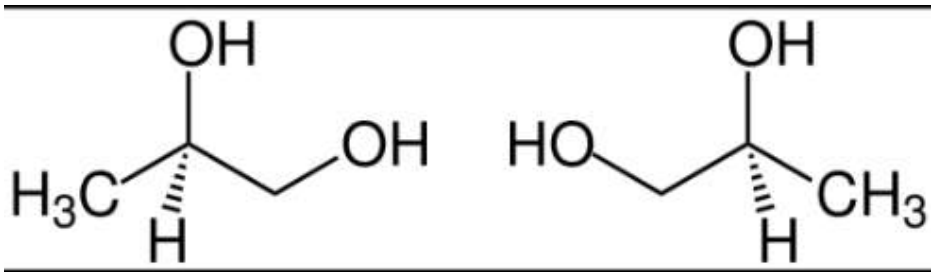


FIGURE 3. FORMULE CHIMIQUE DU PROPYLENE GLYCOL.

TABLEAU 2 PROPRIETES CHIMIQUES DU PROPYLENE GLYCOL

Formule brute	$C_3H_8O_2$ [Isomères]
Masse Molaire	76.0944 ± 0.00036 g/mol

Le propylène glycol ou propane-1,2-diol, appelé aussi 1,2-dihydroxypropane ou méthyle glycol, est un diol de formule chimique$(CH_3 - CHOH - CH_2OH)$ayant de nombreux usages industriels ou agro pharmaceutiques (solvant de pesticides), utilisé aussi à faibles doses comme additif alimentaire. Le propylène glycol est obtenu à partir de la réaction de l'oxyde de propylène avec l'eau pour former du monopropylène glycol, les réactions ultérieures produisant des di-propylène glycol, tri-propylène glycol et autres propylène-glycols.

a) STŒCHIOMÉTRIE:

L'atome de carbone 2 est chiral. Le propane-1,2-diol se présente sous la forme d'une paire d'énantiomères, l'énantiomère R étant lévogyre tandis que le S est dextrogyre. Le propylène glycol est le plus souvent sous la forme d'un racémique [15].

b) PRODUCTION:

En plus des modes de production issus de l'industrie chimique, on note l'existence d'une filière biologique portée en France par l'entreprise (Metabolic Explorer), basée à Clermont-Ferrand, en alliance avec l'entreprise finlandaise UPM offrant un avantage économique significatif par rapport aux procédés pétrochimiques classiques [15]. Le propylène glycol est produit chimiquement par l'hydrolyse de l'oxyde de propylène selon la réaction :

$$CH_2(O)CHCH_3 + H_2O \rightarrow CH_2(OH)CH_2(OH)CH_3$$

c) UTILISATIONS:

Le propylène glycol est utilisé principalement dans la fabrication de résines de polyesters insaturés, ainsi que dans la fabrication du dipropylène glycol et du tri-propylène glycol. C'est également un composant de nombreux produits tels que : formulations d'antigel (automobiles et camions légers), liquide de refroidissement grade U.S.P (laiteries, brasseries, épiceries), liquide de refroidissement grade industriel (systèmes de chauffage et de refroidissement de type industriel et commercial, thermopompes, etc.), fluides hydrauliques, liquides de dégivrage (avions, pistes d'atterrissage), détergents liquides, peintures et vernis (à base de résines alkydes), lubrifiants, plastifiants (encres d'imprimerie). En tant qu'ingrédient alimentaire, pharmaceutique ou cosmétique, le propylène glycol est classé «généralement reconnu inoffensif» par la FDA (Food and Drug Administration) américaine. On l'utilise donc comme solvant, émulsifiant, humectant, émolliant et agent de conservation de ces produits [16].

CHAPITRE II:

MODELISATION NUMERIQUES

I. INTRODUCTION:

Dans ce chapitre nous allons établir les équations différentielles représentant les bilans de matière et les bilans thermiques de notre système réactionnel. Une équation différentielle est une équation ou l'inconnue est une fonction, et qui se présente sous la forme d'une relation entre cette fonction et ses dérivées.

Au cours de l'histoire, les méthodes de calcul ont été l'expression de pratique sans cesse renouvelées. Le développement de l'informatique a largement contribué à une rapide progression de l'ensemble des techniques numériques. Aujourd'hui, la plupart des logiciels que nous employons font appel à des méthodes de plus en plus efficaces. Dans les simulation comme dans les modélisations, l'analyse numérique occupe une place centrale[8].

I.1 Utilisation:

En ingénierie, la simulation est un moyen efficace et économique, couramment utilisé pour faire des études préliminaires et/ou comparatives, tant au stade du développement (conception), qu'au cours du fonctionnement normal des systèmes. Actuellement, plusieurs outils de simulation, parmi lesquels L'Excel, sont utilisés dans l'industrie de plusieurs domaines

I.2 Le logiciel Microsoft Excel:

Microsoft Excel est un logiciel tableur de la suite bureautique Microsoft office développé et distribué par l'éditeur Microsoft. Il est destiné à fonctionner sur les plates-formes Microsoft Windows, Mac OS X, Androïde ou linux. Le logiciel Excel intègre des fonctions de calcul numérique, de représentation graphique, d'analyse de données et de la programmation, laquelle utilise les macros écrites dans le langage VBA (Visual basic for Applications) qui est commun aux autres logiciels de Microsoft Office [9].

II. LES BILANS DE MATIERE ET LE BILAN ENERGETIQUE.

1) BILANS DE MATIERE EN REGIME PERMANENT

Pour chacune des espèces présentes, ce bilan s'écrit sous la forme :

Entrée - sortie + réaction = 0

En particulier, pour le réactif principal A, ce bilan s'écrit:

$$F_{A0} - F_{AS} + r_A V = 0$$

$$V = \frac{F_{A0} - F_{As}}{-r_A}$$

Si dans cette équation $\mathbf{X_A}$ est introduit, **(F_{A0} - F_{As})**est remplacé par**($Q_{A0}.C_{A0}.X_A$)**, et **-r_A** par **[$K.C_{A0}(1-X_A)$].** On aura alors :

$$V = \frac{Q_{A0}.C_{A0}.X_A}{K.C_{A0}(1-X_A)}$$

$$V = \frac{Q_{A0}.X_A}{K - K.X_A}$$

$$K - K.X_A = \frac{Q_{A0}.X_A}{V}$$

Si on remplace $\frac{V}{Q_{A0}}$ par $\boldsymbol{\tau}$ et K par $\mathbf{ke}^{\frac{-Ea}{RT}}$ on déduit **:**

$$X_A = \frac{\tau.ke^{\frac{-Ea}{RT}}}{1 + \tau.ke^{\frac{-Ea}{RT}}} \qquad (1.1)$$

2) BILANS DE MATIERE EN REGIME TRANSITOIRE.

Entrée - Sortie - Réaction = Accumulation

$$Q.C_{i0} - QC_i + r_iV = \frac{dn_i}{dt}$$

$$Q(C_{i0} - C_i) + r_iV = \frac{dn_i}{dt}$$

Si on divise le tout sur V et on remplace $\frac{V}{Q}$ par $\boldsymbol{\tau}$ **:**

$$\frac{C_{i0} - C_i}{\tau} + r_i = \frac{dC_i}{dt}$$

Pour le composé A : $$\frac{C_{A0} - C_A}{\tau} - r_A = \frac{dC_A}{dt} \qquad (2.1)$$

Pour le composé B : $$\frac{C_{B0} - C_B}{\tau} - r_B = \frac{dC_B}{dt} \qquad (2.2)$$

Pour le composé C : $$\frac{C_{C0} - C_C}{\tau} + r_C = \frac{dC_C}{dt} \qquad (2.3)$$

Pour le composé M : $$\frac{C_{M0} - C_M}{\tau} = \frac{dC_M}{dt} \qquad (2.4)$$

3) BILAN DE CHALEUR REGIME TRANSITOIRE.

S'il n'existe pas de changement de phase et si les chaleurs spécifiques des espèces (les C_{pi}) sont constantes dans le domaine de variation des températures, alors le bilan de chaleur s'écrit :

Entrée - Sortie +Echange = Accumulation

$$\sum F_{i0}\left[Cp_i\left(T_0 - T_{Ref}\right) + H°_i\right] - \sum F_{is}\left[Cp_i\left(T - T_{Ref}\right) + H°_i\right] - UA(T - T_P) = \frac{d}{dt}\left[\sum n_i\left[Cp_i\left(T - T_{Ref}\right) + H°_i\right]\right]$$

$$\sum F_{i0}\left[Cp_i\left(T_0 - T_{Ref}\right) + H°_i\right] - \sum F_{is}\left[Cp_i\left(T - T_{Ref}\right) + H°_i\right] - UA(T - T_P) = \sum Cp_i\left[\frac{dn_i}{dt}\left(T - T_{Ref}\right) + n_i\frac{dT}{dt}\right] + \sum H°_i\frac{dn_i}{dt} \quad (3.1)$$

Or, d'après le bilan de matière en régime transitoire :

$$\frac{dn_i}{dt} = F_{i0} - F_{is} + r_i V$$

Alors, le terme $\sum Cp_i\left[\frac{dn_i}{dt}\left(T - T_{Ref}\right) + n_i\frac{dT}{dt}\right]$ peut être développé comme suit:

$$\sum Cp_i\left[\frac{dn_i}{dt}\left(T - T_{Ref}\right) + n_i\frac{dT}{dt}\right] = \\ = \sum Cp_i\left[F_{i0}\left(T - T_{Ref}\right) - F_{is}\left(T - T_{Ref}\right) + r_i V\left(T - T_{Ref}\right) + n_i\frac{dT}{dt}\right] \\ = \sum F_{i0}Cp_i\left(T - T_{Ref}\right) - \sum F_{is}Cp_i\left(T - T_{Ref}\right) + \sum Cp_i r_i V\left(T - T_{Ref}\right) + \sum Cp_i n_i\frac{dT}{dt} \quad (3.2)$$

A présent, on développe le terme: $\sum Cp_i r_i V\left(T - T_{Ref}\right)$

$$\sum Cp_i r_i V\left(T - T_{Ref}\right) = \sum rV\left(T - T_{Ref}\right)\vartheta_i Cp_i \\ = rV\left(T - T_{Ref}\right)\sum \vartheta_i Cp_i = rV\Delta Cp\left(T - T_{Ref}\right) \quad (3.3)$$

Puisque:

$$\sum F_{i0}\left[Cp_i\left(T_0 - T_{Ref}\right) + H°_i\right] = \sum F_{i0}Cp_i\left(T_0 - T_{Ref}\right) + \sum F_{i0}H°_i \quad (3.4)$$

Et

$$\sum F_{is}\left[Cp_i\left(T-T_{Ref}\right)+H°_i\right]=\sum F_{is}Cp_i\left(T-T_{Ref}\right)+\sum F_{is}H°_i \tag{3.5}$$

Alors:

$$\begin{gathered}\sum F_{i0}\left[Cp_i\left(T_0-T_{Ref}\right)+H°_i\right]-\sum F_{is}\left[Cp_i\left(T-T_{Ref}\right)+H°_i\right]= \\ \sum F_{i0}Cp_i\left(T_0-T_{Ref}\right)-\sum F_{is}Cp_i\left(T-T_{Ref}\right)+\sum(F_{i0}-F_{is})H°_i\end{gathered} \tag{3.6}$$

Le terme $\sum(F_{i0}-F_{is})H°_i$ peut être développé en employant le bilan de matière:

$$\begin{aligned}\sum(F_{i0}-F_{is})H°_i &= \sum\left(-r_iV+\frac{dn_i}{dt}\right)H°_i=-\sum\vartheta_iH°_irV+\sum H°_i\frac{dn_i}{dt} \\ &= -rV\Delta H°_R+\sum H°_i\frac{dn_i}{dt}\end{aligned} \tag{3.7}$$

On remplace 3.7 dans 3.6, ensuite 3.6 et 3.3 tous 3.2, ensuite 3.2 dans 3.1, on obtient :

$$\begin{aligned}&\sum F_{i0}Cp_i\left(T_0-T_{Ref}\right)-\sum F_{is}Cp_i\left(T-T_{Ref}\right)-rV\Delta H°_R+\sum H°_i\frac{dn_i}{dt}-UA(T-T_P) \\ &\quad=\sum F_{i0}Cp_i\left(T-T_{Ref}\right)-\sum F_{is}Cp_i\left(T-T_{Ref}\right)+rV\Delta Cp\left(T-T_{Ref}\right)+\sum Cp_in_i\frac{dT}{dt} \\ &\quad+\sum H°_i\frac{dn_i}{dt}\end{aligned}$$

Ou encore après simplifications :

$$\begin{aligned}\sum F_{i0}Cp_i(T_0-T)-rV\left[\Delta H°_R+\Delta Cp\left(T-T_{Ref}\right)\right]-\ UA(T-T_P) \\ =\left[V\sum C_iCp_i\right]\frac{dT}{dt}\end{aligned} \tag{3.8}$$

4) BILAN DE CHALEUR REGIME PERMANENT.

$$\sum F_{i0}Cp_i(T_0-T)-rV\left[\Delta H°_R+\Delta Cp\left(T-T_{Ref}\right)\right]-\ UA(T-T_P)=0 \tag{4.1}$$

$$rV=-r_AV=F_{A0}X \tag{4.2}$$

$$\theta_i=\frac{F_{i0}}{F_{Ao}} \tag{4.3}$$

On remplace (4.2) et (4.3) dans (4.1) :

$$\sum \theta_i Cp_i(T_0 - T) - X\left[\Delta H°_R + \Delta Cp\left(T - T_{Ref}\right)\right] - \frac{UA(T - T_P)}{F_{Ao}} = 0$$

$$X = \frac{\sum \theta_i Cp_i(T - T_0) + \frac{UA(T-T_P)}{F_{Ao}}}{-\left[\Delta H°_R + \Delta Cp\left(T - T_{Ref}\right)\right]} \tag{4.4}$$

III. MÉTHODES NUMÉRIQUES UTILISÉES:

III 1. L'APPROCHE NUMÉRIQUE:

Les méthodes numériques employées pour résoudre les équations différentielles sont des méthodes approximatives, basées sur la discrétisation de la véritable t ainsi que sur l'utilisation de différences finies pour approcher les dérivées. Le problème se ramène alors à un calcul itératif, facile à automatiser à l'aide d'un programme informatique. Pour effectuer ce calcul numérique, l'utilisateur doit disposer de :

1) de la durée **T** de la simulation numérique;
2) des conditions initiales et de la fonction ***f***;
3) du pas de discrétisation **h**.

L'intervalle**[0,T]**est alors divisé en N subdivisions de même longueur h. finalement la méthode numériques renvoie une liste**(y_0,y_1,,...,y_n)**contenant les valeurs approchées de **y(t_n)**pour les différents instants **t_n= nh.**

III 2. MÉTHODE D'EULER:

La méthode d'Euler est une procédure numérique qui permet de résoudre de façon approximative des équations différentielles ordinaires de premier ordre avec conditions initiales. Sa forme ordinaire est la suivante:

$$\begin{cases} y' = f(t, y(t)), & 0 \leq t \leq T \\ y(0) = y0 \end{cases}$$

- y(t) est un scalaire.
- f(t,y(t)) la fonction régulière.

On peut intégrer cette équation comme suit :

$$y(tn+1) = y(tn) + \int_{tn}^{tn+1} f(t, y(t))dt \qquad (5.1)$$

La méthode d'Euler consiste à approcher l'intégrale par la méthode des rectangles à gauche :

$$\int_{tn}^{tn+1} f(t, y(t))dt \approx h \times f(tn, y(tn)) \qquad (5.2)$$

Schéma itératif :

$$\begin{cases} yn+1 = yn + h f(tn, y(tn)), & n = 0,1,\ldots,N \\ y0 = y(0) \end{cases}$$

Où $\mathbf{y_n}$: approximation numériques de $\mathbf{y(t_n)}$.

L'algorithme d'Euler se présente ainsi comme suit :

- Initialisation du pas h, et de la durée T.

- Initialisation des conditions initiales :t = 0 et y = y(0).

Tant que t ≤ T faire :

(a) Calcul de K1 = f(t, y).

(b) $y_{n+1} = y_n + hK1$; t = t+ h

III 3. LES METHODES DE RUNGE ET KUTTA :

Les méthodes de Runge-Kutta se basent sur des schémas numériques à un pas basé sur la discrétisation de la variable **t**. On note **h**e pas et $\mathbf{y_n}$ la valeur approchée de$\mathbf{y(t_n)}$pour les différents instants $\mathbf{t_n = nh}$. En intégrant l'équation différentielle entre $\mathbf{t_n}$ et $\mathbf{t_{n+1}}$on obtient une relation identique à la relation 5.1 :

$$y(tn+1) = y(tn) + \int_{tn}^{tn+1} f(t, y(t))dt \qquad (5.3)$$

Revenons à la méthode d'Euler :

- **Euler explicite :**

(La figure 4.)Démontre la méthode du rectangle à gauche, on voit que la méthode sous-estime (surestime) l'aire quand la fonction f croît(décroît) au cours du temps. L'erreur produite correspond à l'aire grisée de forme quasi-triangulaire et de

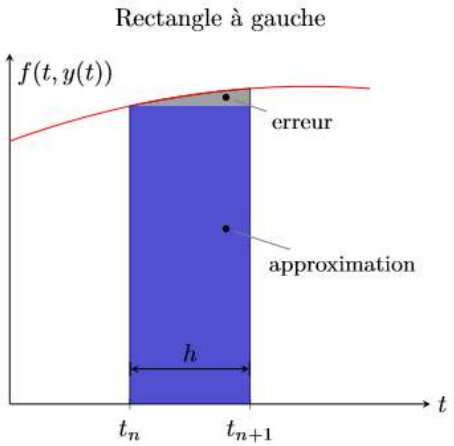


FIGURE 4 METHODE DE RECTANGLE A GAUCHE

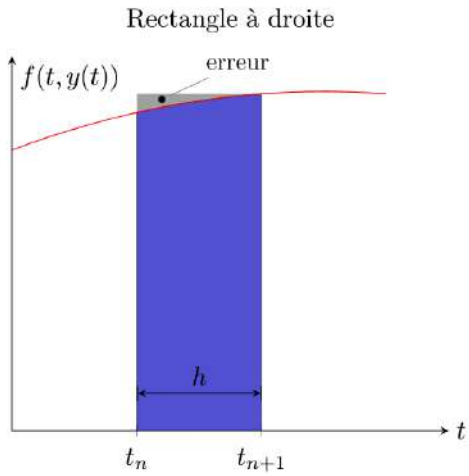
Dimension $\frac{1}{2}$h × ph où p est la pente de f à l'instant $\mathbf{t_n}$. L'erreur vaut donc à peu près :

$$e^E \approx \frac{1}{2}\, \mathrm{p} \times \mathrm{h}^2.$$

On dit que la méthode d'Euler est d'ordre un.

- **Euler implicite :**

Quand on approche l'intégral par la méthode du rectangle à droite :



$$\int_{tn}^{tn+1} f(t, y(t))dt \approx h \times f(tn+1, y(tn+1)) \qquad (5.4)$$

$$\begin{cases} yn+1 = yn + h f(tn+1, yn+1), \\ y0 = y(0) \end{cases}$$

FIGURE 5METHODE DE RECTANGLE A DROITE

Dans ce cas, $\mathbf{y_{n+1}}$ est présent dans le terme de gauche et celui de droite. Contrairement à la méthode d'Euler explicite, la grandeur recherchée $\mathbf{y_{n+1}}$est reliée à

une fonction qui dépend de cette même grandeur. Autrement dit, $\mathbf{y_{n+1}}$est définit implicitement d'où le nom de la méthode. Cette méthode produit une erreur opposée à celle de la méthode d'Euler explicite. Elle est donc aussi d'ordre un.

a) RUNGE_KUTTA D'ORDRE 2:

On remarque que l'approximation de la méthode de trapèze est plus précise, car l'estimation de l'intégrale se fait en calculant l'aire d'un trapèze au lieu de celui d'un rectangle. Elle est définie par l'approximation suivante:

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{b-a}{2}[f(a) - f(b)]$$

En appliquant cette approximation à l'équation (5.1) on obtient :

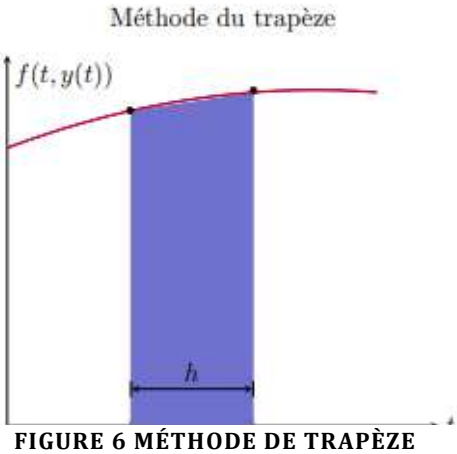


FIGURE 6 MÉTHODE DE TRAPÈZE

$$\int_{atn}^{tn+1} f(t, y(t))dt \approx \frac{h}{6}\left\{f(t_n, y(t_n)) + 4f\left[t_{n+\frac{1}{2}}, \left(y\left(t_{n+\frac{1}{2}}\right) + f(t_{n+1}, y_{n+1})\right)\right]\right\}$$

Ici, l'intégrale dépend des valeurs de $\mathbf{y_n}$ et $\mathbf{y_{n+1}}$ ce qui, si on en restait là, donnerait lieu à une méthode implicite. Pour éviter ces complications, on utilise la méthode d'Euler (explicite) afin d'estimer la valeur y_{n+1} qui intervient dans $\mathbf{f(t_{n+1}, y(t_{n+1}))}$. On obtient le schéma itératif suivant:

$$y_{n+1} = y_n + h\left(\frac{1}{2}k_1 + \frac{1}{2}k_2\right) \textbf{ Avec } \begin{cases} \mathbf{k1} = \mathbf{f}(\mathbf{t}_n, \mathbf{y}_n) \\ \mathbf{k2} = \mathbf{f}\left(\mathbf{t}_n + \mathbf{h},\ \mathbf{y}_n + \mathbf{hk1}\right) \\ \mathbf{y0} = \mathbf{y0} \end{cases}$$

b) RUNGE KUTTA D'ORDRE 4:

La méthode de Runge-Kutta d'ordre 4 est une étape supplémentaire dans le raffinement du calcul de l'intégrale (5.1). Au lieu d'utiliser la méthode des trapèzes, on utilise la méthode de Simpson. Celle-ci consiste à remplacer la fonction intégrée par une parabole passant par les points extrêmes et le point milieu

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{b-a}{6}\ [f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)]$$

En appliquant l'intégrale (5.1), cela donne:

$$\int_{atn}^{tn+1} f(t, y(t))dt \approx \frac{h}{6}\left\{f(t_n, y(t_n)) + 4f\left[t_{n+\frac{1}{2}}, \left(y\left(t_{n+\frac{1}{2}}\right) + f(t_{n+1}, y_{n+1})\right)\right]\right\}$$

Dans le premier, on remplace $\mathbf{y_{n+1/2}}$ par sa valeur déduite de la méthode d'Euler explicite; à savoir $y^a_{n+1/2} = y_n + h/2f(t_n, y_n)$. Dans le deuxième terme, on remplace $\mathbf{y_{n+1/2}}$ par sa valeur déduite de la méthode d'Euler implicite : $y^b_{n+1/2} = y_n + h/2f(t_{n+1/2}, y_{n+1/2})$ que l'on va approcher par $y_n + h/2f(t_{n+1/2}, y^a_{n+1/2})$. Les méthodes d'Euler implicite et explicite produisant des erreurs quasi-opposées, on a ainsi l'espoir de minimiser l'erreur sur le calcul de $4f(t_{n+1/2}, y_{n+1/2})$. Pour résumer, on écrira:

$$\mathbf{4f(t_{n+1/2}, y_{n+1/2}) \approx 2k2 + 2k3} \qquad \left\{\begin{array}{l} \mathbf{k1 = f(t_n, y_n)} \\ \mathbf{k2 = f(t + (1/2)h, y_n + (1/2)hk_1} \\ \mathbf{k3 = f(t_n + (1/2)h, y_n + (1/2)hk_2)} \end{array}\right\}$$

Quant au terme $f(t_{n+1}, y_{n+1})$, on l'approche en estimant y_{n+1} par la méthode du point mn+1ilieu, c'est-à-dire en appliquant la méthode du rectangle au milieu :

$$\mathbf{y_{n+1} \approx y_n + hf(t_{n+1/2}, y_{n+1/2}) \approx y_n + hf\ (t_{n+1/2}, y^b_{n+1/2})}$$

Avec :

$$\mathbf{y_{n+1} \approx y_n + h\ \ \frac{1}{6}k1 + \frac{1}{3}k2 + \frac{1}{3}k3 + \frac{1}{6}k4} \qquad \left\{\begin{array}{l} \mathbf{k1 = f(t_n, y_n)} \\ \mathbf{k2 = f(t + (1/2)h, y_n + (1/2)hk_1)} \\ \\ \mathbf{k3 = f(t_n + (1/2)h, y_n + (1/2)hk_2)} \\ \mathbf{k4 = f(t_n + h, y_n + hk3)} \end{array}\right\}$$

Par rapport à la méthode Runge_kutta 2, ce schéma numérique exige deux fois plus de calcul à chaque pas et donc un temps de calcul plus long, sans parler des erreurs d'arrondi qui s'accumulent plus vite. Cependant, ce défaut est compensé par un gain de précision.

CHAPITRE III:

RESULTATS ET DISCUSSIONS

I. PRODUCTION DE PROPYLENE GLYCOL DANS UN RCPA AVEC REFROIDISSEMENT EXTERNE : OBJECTIF DE L'ETUDE.

Les réactions exothermiques conduites dans des réacteurs continus parfaitement agités (RCPA) peuvent conduire à des conditions d'opérations non stables. Dans cette étude, nous avons choisi d'étudier la réaction exothermique du premier ordre concernant l'hydrolyse (en milieu acide) de l'oxyde de propylène **(**$CH_2(O)CHCH_3$: **A)** qui donne du propylène glycol **(**$CH_2(OH)CH_2(OH)CH_3$: **C)**. Il s'agit d'une étude du comportement thermique du réacteur en mode dynamique à travers une modélisation numérique. La réaction est conduite avec un excès de second réactif qui est l'eau **(**H_2O **: B)** et du méthanol **(**CH_3OH : **M)** employé comme deuxième solvant mais qui n'entre pas dans la réaction. Le méthanol dans cette réaction joue le rôle d'un inerte. Son effet est perceptible sur le coefficient de dilatation chimique, il participe dans le mélange réactionnel avec sa capacité calorifique [13]. La réaction s'écrit :

$$CH_2(O)CHCH_3 + H_2O \rightarrow CH_2(OH)CH_2(OH)CH_3$$

$$A + B \rightarrow C$$

II. CARACTERISTIQUES DU REACTEUR ET CONDITIONS OPERATOIRES.

Il est d'une importance capitale que de préciser les conditions d'opération et les différents paramètres du réacteur agité en continu (RAC ou RCPA) ainsi que les paramètres de la cinétique chimique. (Le tableau 3.) Donne les valeurs utilisées dans la simulation. Ces grandeurs sont tirées de la référence[13].

TABLEAU 3 PARAMETRES DU REACTEUR ET DE LA CINETIQUE REACTIONNELLE.

Paramètre	Valeur	Unité
V (Volume du CSTR)	40.1 (1.14)	ft^3 (m^3)
Q (Débit volumique à l'entrée)	326.4 (9.24)	ft^3/h (m^3/h)
F_{A0} (Débit molaire de A entrant)	43.03 (19.52)	lbmol/h (kmole/h)
F_{B0} (Débit molaire de B entrant)	802.8 (364.14)	lbmol/h (kmole/h)
F_{M0} (Débit molaire de M entrant)	71.78 (32.29)	lbmol/h (kmole/h)
F_{C0} (Débit molaire de C entrant)	0.00	lbmol/h (kmole/h)
T_0 (Température à l'entrée)	75 (297.04)	°F (K)
A (Surface d'échange)	40 (3.72)	ft^3 (m^2)
T_P (Température à la paroi)	85 (302.59)	°F (K)
U (Coefficient d'échange)	100 (567.83)	Btu/ft^2-°F(W/m^2K)
Ea (Energie d'activation)	32400 (75362.4)	Btu/lbmol (kJ/kmole)
k (Facteur de fréquence)	(19.96E+12)	h^{-1}

Les propriétés thermodynamiques (capacités calorifiques et enthalpies de formation des constituants) sont rassemblées dans (le tableau 4). On supposera, pour les calculs et la simulation, que les capacités calorifiques ne dépendent pas de la température[13].

TABLEAU 4 PROPRIÉTÉS THERMODYNAMIQUESDES ESPÈCES

Constituant	C_p(Btu /lbmol°F)	H_f^{518}(Btu/lbmol)
Oxyde de propylène	35	- 66600
Eau	18	-123000
Propylène glycol	46	-226000
Méthanol	19,5	-

Quant au réacteur, il est représenté schématiquement sur (la figure 7).Il s'agit d'un réacteur continu parfaitement agité muni d'une double enveloppe dans laquelle de l'eau liquide portée à une température contrôlée circule. Elle sert à refroidir la paroi du réacteur et ainsi évacuer la chaleur dégagée par la réaction.

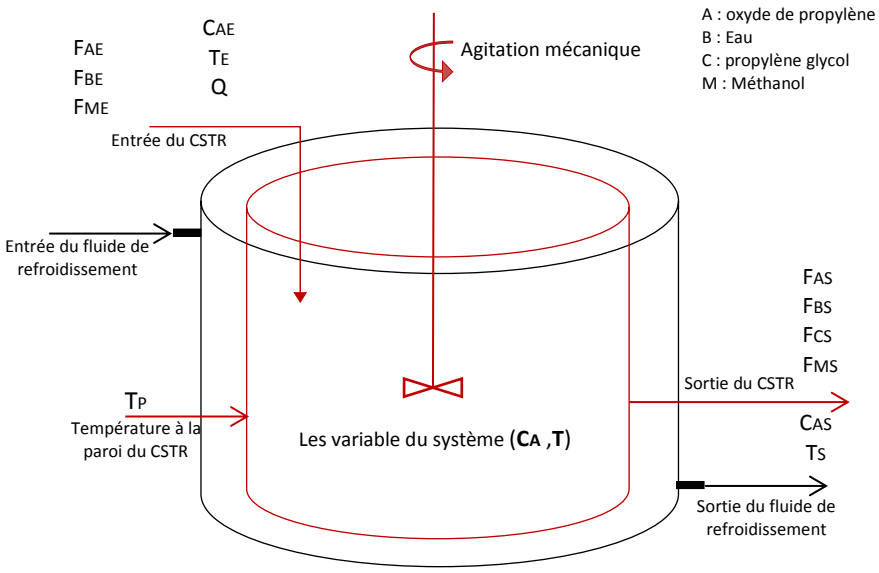


FIGURE 7 SCHEMA D'UN CSTR AVEC DOUBLE ENVELOPPE DE REFROIDISSEMENT.

III. PRÉSENTATION D'UNE SIMULATION TYPE.

Dans cette partie, nous allons résoudre les bilans de matière et de chaleur établis dans le chapitre II en régime permanent et en régime transitoire. La première servira à déterminer les conditions de marche du réacteur (Température stable et taux de conversion associé), et la seconde servira à établir l'évolution dans le temps de la température du réacteur ainsi que celles des concentrations des espèces présentes. On vérifiera par la même occasion qu'au bout d'un temps suffisamment long, ces grandeurs tendent vers les valeurs calculées à partir des bilans établis en régime permanent.

III 1. RÉGIME PERMANENT:

Les deux équations (1.1) et (4.4)sont les bilans de matière et de chaleur en régime permanent qui représentent deux équations reliant le taux de conversion du réactif principal $X_A$et la température Tdu milieu réactionnel :

$$X_A(BM) = \frac{\tau . ke^{\frac{-Ea}{RT}}}{1 + \tau . ke^{\frac{-Ea}{RT}}}$$

$$X_A(BC) = \frac{\sum \theta_i Cp_i (T - T_0) + \frac{UA(T - T_P)}{F_{Ao}}}{-\left[\Delta H°_R + \Delta Cp\left(T - T_{Ref}\right)\right]}$$

La résolution de ces équations se fait en égalisant les deux taux de conversion :$X_A(BM) = X_A(BC)$. Le calcul des différentes grandeurs qui apparaissent dans ces équations se fait de la manière suivante :

a. LA CHALEUR DE LA REACTION A UNE TEMPERATURE T :

Elle est calculée à partir de la chaleur de la réaction donnée à une température de référence et des chaleurs spécifiques des espèces réactives et produites. La température de référence à laquelle des données sont disponibles est égale à 68 °F (20 °C).

$$\boldsymbol{\Delta H°_R(T) = \Delta H°_R\left(T_{Ref}\right) + \Delta Cp\left(T - T_{Ref}\right)}$$

$$\boldsymbol{H°_A(68F°) = -66600\ \frac{Btu}{lbmol}}$$

$$\boldsymbol{H°_B(68F°) = -123000\ \frac{Btu}{lbmol}}$$

$$\boldsymbol{H°_C(68F°) = -226000\ \frac{Btu}{lbmol}}$$

$\boldsymbol{H°_A}$ Et $\boldsymbol{H°_C}$ sont calculées à partir des données de la chaleur de combustion.

$$\Delta \boldsymbol{H°_R}(\mathbf{68}\boldsymbol{F°}) = -\mathbf{226000} - (-\mathbf{123000}) - (-\mathbf{66600})$$
$$= -\mathbf{36400}\frac{\mathbf{btu}}{\mathbf{lbmol}\ \boldsymbol{oxyde\ de\ propyl\grave{e}ne}}$$

$$\Delta \boldsymbol{Cp} = Cp_C - Cp_B - Cp_A = 46 - 18 - 35 = -7\ \frac{\mathbf{Btu}}{\mathbf{lbmol.°F}}$$

$$\Delta \boldsymbol{H°_R}(\boldsymbol{T}) = -\mathbf{36400} + (-\mathbf{7})(\boldsymbol{T} - \mathbf{528}) \qquad T\ est\ en\ °\mathbf{R}$$

b. LES STŒCHIOMETRIES ($\boldsymbol{C_{A0}}, \boldsymbol{\theta_i}, \boldsymbol{\tau}$) ;

Puisque le débit volumique total du liquide entrant le réacteur est de 326,4 ft^3/h et V=40,1 ft^3, alors :

$$\tau = \frac{V}{Q} = \frac{40{,}1}{326{,}4} = 0{,}123\ \mathbf{h}$$

$$C_{A0} = \frac{F_{Ao}}{Q} = \frac{43}{326{,}3} = 0{,}132\ \mathbf{lbmol/ft^3}$$

Pour le Méthanol :

$$\theta_M = \frac{F_{Mo}}{F_{Ao}} = \frac{71{,}87}{43} = 1{,}669842007$$

Pour l'eau :

$$\theta_B = \frac{F_{Bo}}{F_{Ao}} = \frac{802{,}8}{43} = 18{,}65241636$$

c. EVALUATION DES TERMES DE BILAN DE MATIERE :

La conversion calculée à partir du bilan de matière est trouvée à partir de l'équation :

$$X_A = \frac{(0{,}123), (16{,}96 \times 10^{12})e^{\frac{-32400}{1{,}987T}}}{1 + (0{,}123), (16{,}96 \times 10^{12})e^{\frac{-32400}{1{,}987T}}}$$

d. EVALUATION DES TERMES DE BILAN DE CHALEUR :

$$\sum \theta_i Cp_i = Cp_A + \theta_B Cp_B + \theta_M Cp_M = 35 + (18{,}65)(18) + (1{,}67)(19{,}5) = 403{,}3\ \mathbf{Btu/lbmol}, °\mathbf{F}$$

$$T_0 = 75°\mathbf{F} = 535°\mathbf{R}$$
$$T_P = 68°\mathbf{F} = 528°\mathbf{R}$$

En substituant toutes ces quantités dans le bilan énergétique, on obtient

$$\boldsymbol{X} = \frac{(\mathbf{403.3})(\boldsymbol{T} - \mathbf{535}) + \frac{(\mathbf{4000})(\boldsymbol{T}-\mathbf{528})}{\mathbf{43.03}}}{[-\mathbf{36400} - (\mathbf{7})(\boldsymbol{T} - \mathbf{528})]}$$

Solution :

Il existe plusieurs façons différentes de résoudre ces deux équations simultanées. La façon la plus simple est d'utiliser une méthode graphique. L'idée est de tracer les évolutions des taux de conversion calculés à partir des deux bilans de matière et enthalpique à différentes températures de réacteur, ensuite de tracer ces deux grandeurs dans le même graphique en fonction de la température. L'intersection des deux courbes donne la solution où à la fois les bilans massiques et énergétiques sont satisfaits. De plus, en traçant ces deux courbes, nous pouvons apprendre s'il y a plus d'une intersection (c.-à-d. Etats stables multiplie) [14].

(Le tableau 5) représente une partie de la feuille Excel dans laquelle les valeurs calculées de $\mathbf{X_{BM}}$ et $\mathbf{X_{BC}}$ en fonction de la température sont reportées et (la figure 8) les évolutions des deux taux de conversions. On voit que dans notre cas, il existe un seul point d'intersection ce qui signifie que le réacteur possède un seul point de fonctionnement stable.

TABLEAU 5 RÉSULTATS DU CALCULE

T(°R)	X_{MB}	X_{EB}
562	0,343196	0,340313
563	0,354905	0,353789
564	0,366747	0,36726
565	0,37871	0,380725
566	0,39078	0,394185

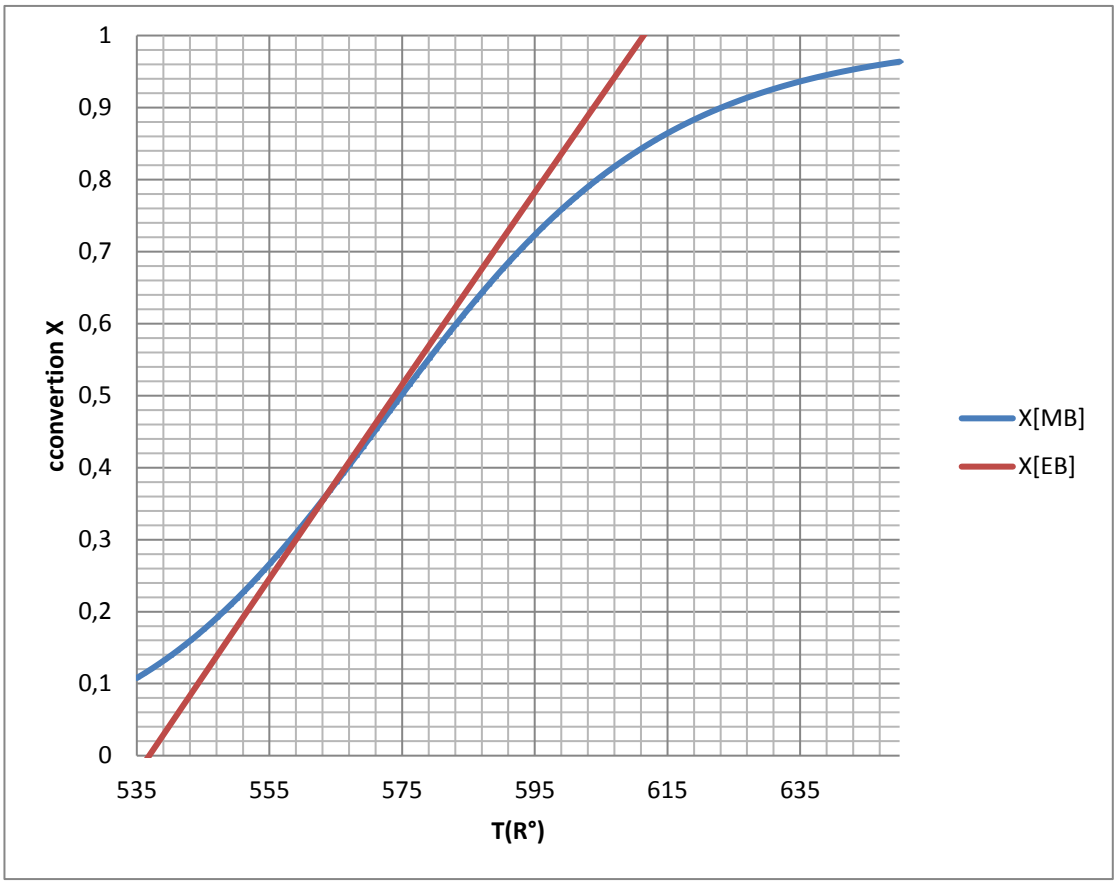


FIGURE 8 LA CONVERSATION X_{MB} ET X_{EB} EN FONCTION DE LA TEMPERATURE

III 2. RÉGIME TRANSITOIRE :

A partir du chapitre II nous avons les équations :

Pour le bilan de matière équations (2.1) (2.2) (2.3) (2.4):

Pour le composée A : $\frac{C_{A0}-C_A}{\tau} - r_A = \frac{dC_A}{dt}$

Pour le composée B : $\frac{C_{B0}-C_B}{\tau} - r_B = \frac{dC_B}{dt}$

Pour le composée C : $\frac{C_{C0}-C_C}{\tau} + r_C = \frac{dC_C}{dt}$

Pour le composée M : $\frac{C_{M0}-C_M}{\tau} = \frac{dC_M}{dt}$

Et pour le bilan de chaleur (3.8) :

$$\frac{\sum \boldsymbol{F_{i0}Cp_i(T_0 - T) - rV\left[\Delta H^\circ{}_R + \Delta Cp\left(T - T_{Ref}\right)\right] - UA(T - T_P)}}{\boldsymbol{V\sum C_i Cp_i}} = \frac{\boldsymbol{dT}}{\boldsymbol{dt}}$$

a. ÉVALUATION DES THERMES RÉACTIONNELS :

$$r_A = -C_A, ke^{\frac{-Ea}{RT}} = -C_A(16{,}96 \times 10^{12})e^{\frac{-32400}{1{,}987T}}$$

$$r_B = r_A = -C_A(16{,}96 \times 10^{12})e^{\frac{-32400}{1{,}987T}}$$

$$r_C = -r_A = C_A(16{,}96 \times 10^{12})e^{\frac{-32400}{1{,}987T}}$$

b. LES STŒCHIOMETRIES ($\boldsymbol{C_{B0}}$, $\boldsymbol{C_{M0}}$):

Quand le débit volumique total du liquide entrant le réacteur est 326,4 ft^3/h, alors :

$$C_{B0} = \frac{F_{Bo}}{Q} = \frac{802{,}8}{326{,}3} = 2{,}46\ \mathbf{lbmol/ft^3}$$

$$C_{M0} = \frac{F_{Mo}}{Q} = \frac{71{,}78}{326{,}3} = 0{,}22\ \mathbf{lbmol/ft^3}$$

c. EVALUATION DES TERMES DE BILAN DE MATIERE :

Pour le composée A : $\frac{0,132-C_A}{0,122} + C_A(16,96 \times 10^{12})e^{\frac{-32400}{1,987T}} = \frac{dC_A}{dt}$

Pour le composée B : $\frac{2,46-C_B}{0,122} + C_A(16,96 \times 10^{12})e^{\frac{-32400}{1,987T}} = \frac{dC_B}{dt}$

Pour le composée C : $\frac{0-C_C}{0,122} - C_A(16,96 \times 10^{12})e^{\frac{-32400}{1,987T}} = \frac{dC_C}{dt}$

Pour le composée M : $\frac{0,22-C_M}{0,122} = \frac{dC_M}{dt}$

d. EVALUATION DES TERMES DU BILAN DE CHALEUR :

$$\frac{(403,3)(\boldsymbol{T}-\mathbf{535}) + C_A(16,96 \times 10^{12})e^{\frac{-32400}{1,987T}}(\mathbf{40,1})(-\mathbf{36400}-(\mathbf{7})(\boldsymbol{T}-\mathbf{528})) + (\mathbf{4000})(\boldsymbol{T}-\mathbf{528})}{(\mathbf{40,1})\sum[C_A(35)+C_B(18)+C_C(46)+C_M(19,5)]} = \frac{\boldsymbol{dT}}{\boldsymbol{dt}}$$

Solution :

En utilisant la méthode de Runge et Kutta de 4eme ordre programmée sous Excel, on peut enfin résoudre cet ensemble d'équations différentielles et obtenir par la suite la variation des concentrations des espèces et de température du réacteur en fonction du temps. (Les figures 9 et 10) représentent les évolutions des concentrations des espèces réactives et produites au cours du temps. On remarque une diminution continue de la concentration de l'oxyde de propylène et celle de l'eau associée à une augmentation de la concentration du propylène glycol. (La figure 11) fait apparaitre l'évolution de la température du milieu réactionnel.

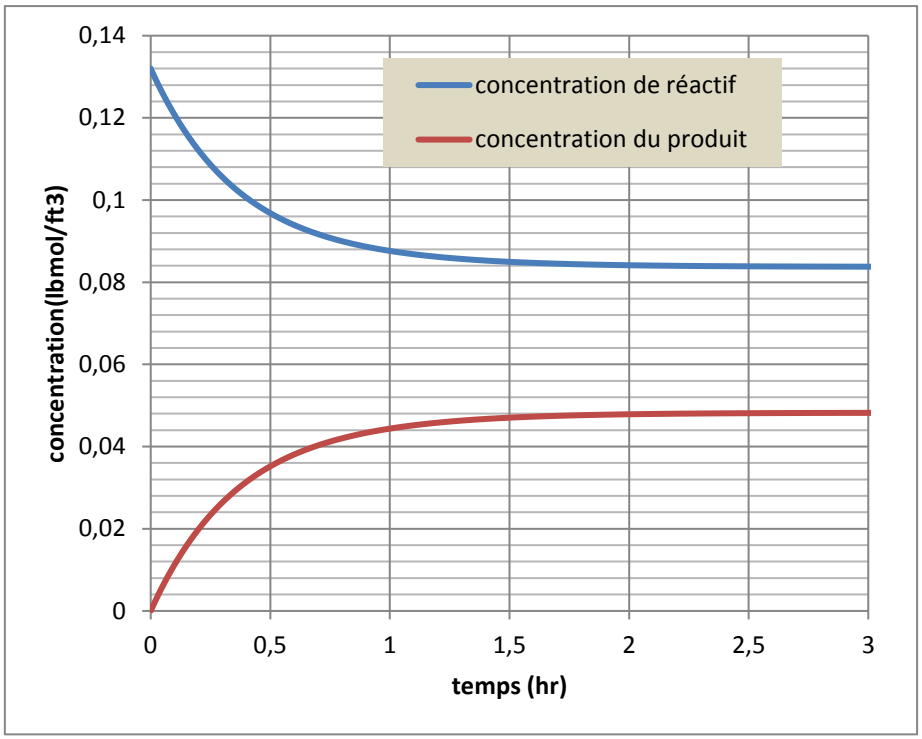


FIGURE 9.CONCENTRATION DU RÉACTIF PRINCIPAL (OXYDE DE PROPYLÈNE) ET DU PRODUIT (PROPYLÈNE GLYCOL) EN FONCTION DU TEMPS

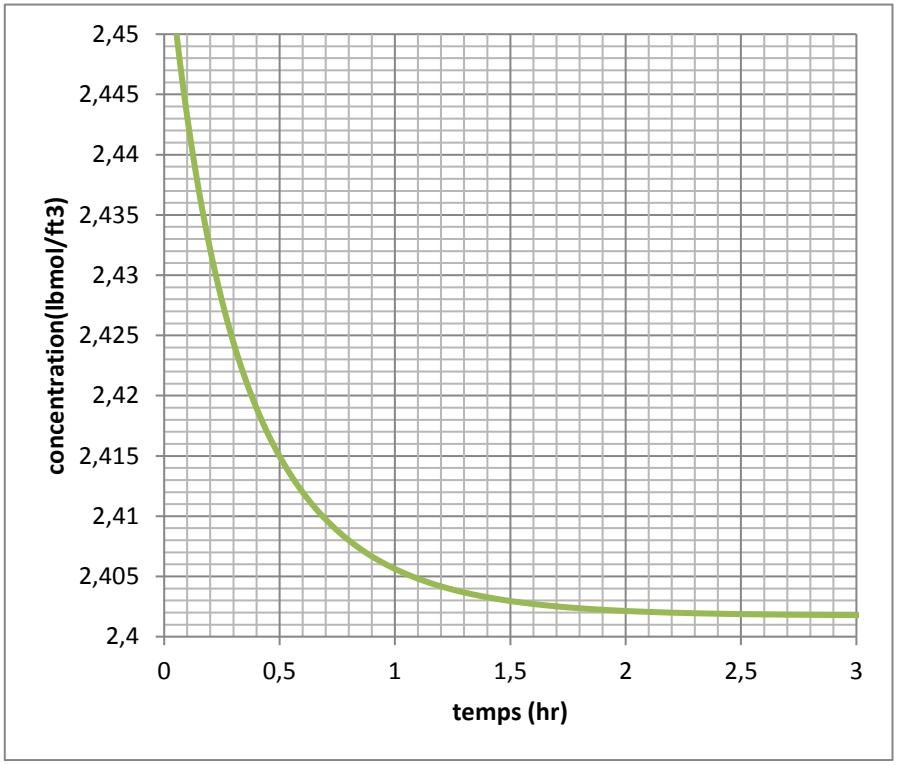


FIGURE 10.CONCENTRATION DE L'EAU EN FONCTION DU TEMPS

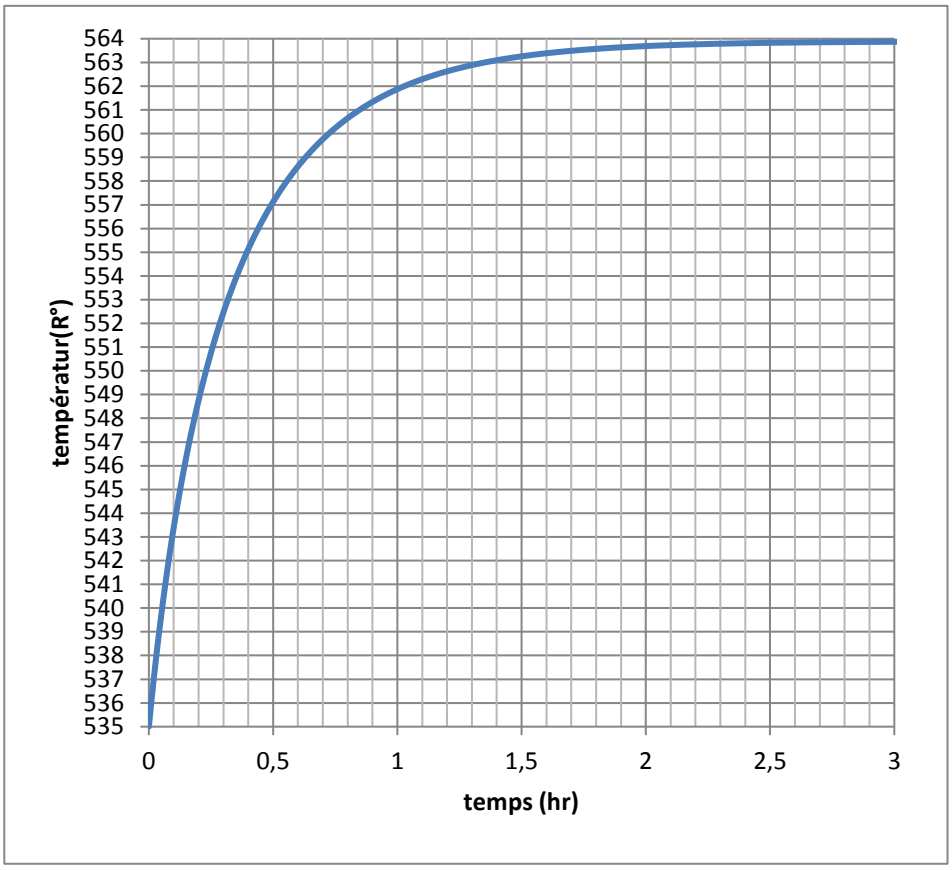


FIGURE 11.TEMPÉRATURE DE SORTIE EN FONCTION DU TEMPS.

A partir des deux graphes, on peut déterminer les valeurs de la concentration du réactif principal et celle de la température auxquelles se stabilise le réacteur. Elles correspondent respectivement à :

- la concentration de A :$C_{Af} = 0{,}084\ lbmol/ft^3$. Le taux de conversion associé est calculé comme suit : $X = \frac{C_{A0}-C_{Af}}{C_{A0}} = \frac{0.132-0.084}{0.132} = 0.36$
- La température est de 564°**R.**

On retrouve bien les valeurs calculées en régime permanant, ce qui indique que la simulation est correcte. Ces courbes permettent aussi d'estimer le temps nécessaire pour attendre le régime permanent. Ici on voit qu'au bout de 1,7 heures le régime permanent est atteint.

IV. EFFET DES PARAMÈTRES OPÉRATOIRES.

IV. 1. L'INFLUENCE DE LA TEMPERATURE DE L'ENTREE DES FLUIDES:

Plusieurs simulations ont été effectuées à des températures d'entrée des fluides réactifs. Jusqu'à une température d'entrée de 537 °R (77 °F), les évolutions des concentrations et de la température dans le réacteur étaient semblables à celles reportées sur (les figures 9, 10 et 11) Cependant, lorsque la température de l'entrée dépasse la valeur 538 °R (78 °F), on observe un comportement différent. En effet, tel que l'on le voit sur (les figure 12, 13 et 14) qui correspondent à une température de 550 °R (90 °F), la courbe de l'évolution de la concentration du réactif présente un minimum indiquant que la concentration atteint après un certain temps une valeur minimale ensuite remonte pour se stabiliser à une valeur plus élevée. Ce minimum correspond à un maximum de la température donnant à la vitesse de la réaction sa valeur maximale. Cet effet est d'autant plus accentué que la température de l'entrée est élevée. Il s'agit là d'un phénomène qui engendre des pics de température pouvant détruire le réacteur ou altérer les substances présentes. Dans l'exemple présenté ici, on voit un écart de température de 5°C. Par ailleurs, le temps de stabilisation de la température devient de plus en plus court à mesure que la température de l'entrée est élevée. Il passe de 1,7 heures à 75 °F à 0,5 heures à 90 °F.

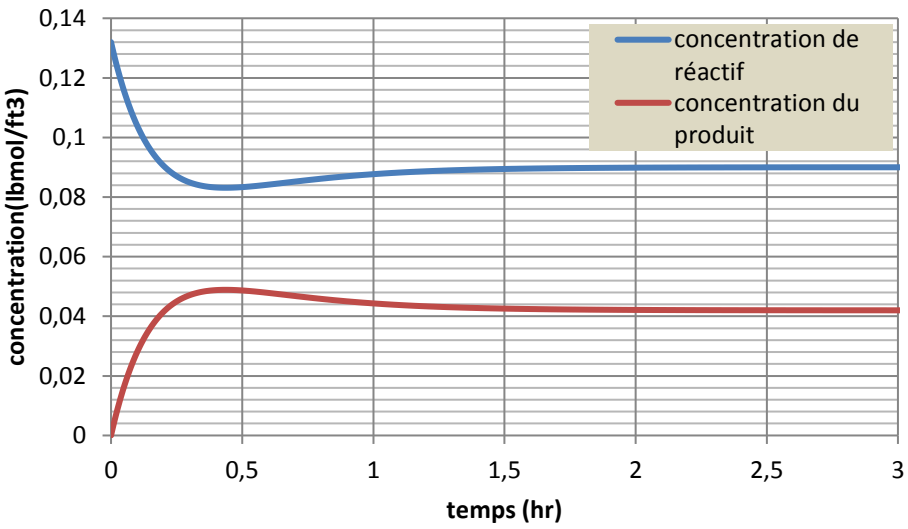


FIGURE 12.CONCENTRATION DE RÉACTIF ET PRODUIT EN FONCTION DU TEMPS

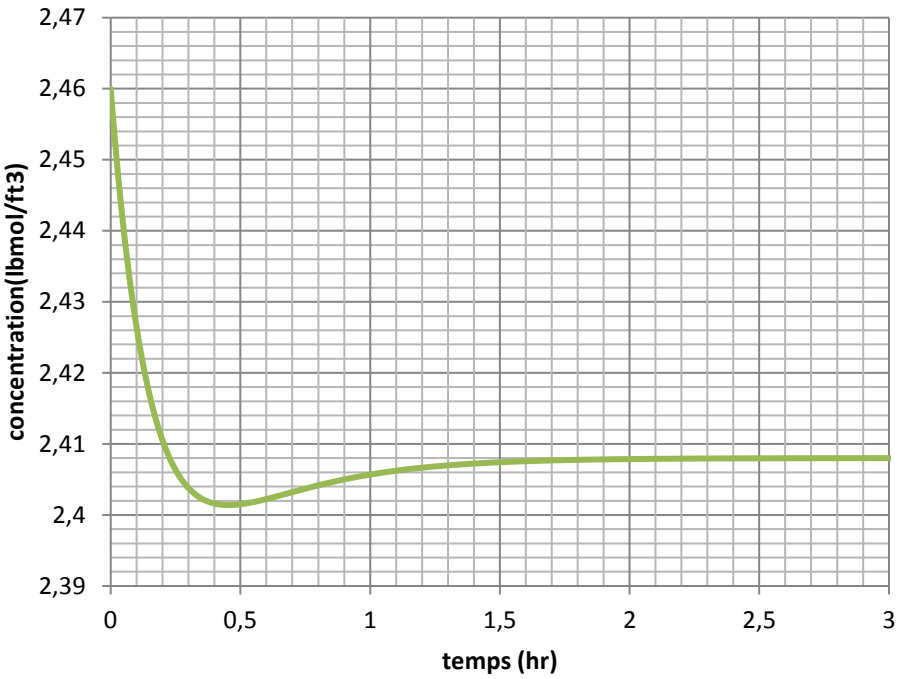


FIGURE 13.CONCENTRATION DE L'EAU EN FONCTION DU TEMPS.

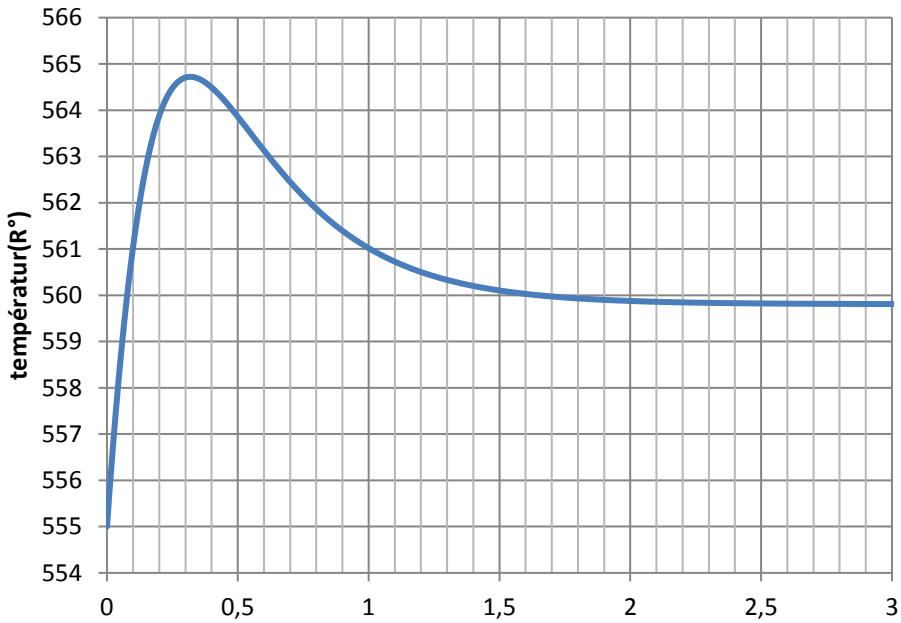


FIGURE 14.LA TEMPÉRATURE DE SORTIE EN FONCTION DU TEMPS

IV. 2. INFLUENCE DE LA TEMPERATURE DU FLUIDE FRIGORIFIQUE.

(Les figures 15, 16 et 17) représentent les réponses graphiques des concentrations des réactifs et des produits ainsi que celle de la température du réacteur en fonction du temps lorsque la température du fluide frigorifique est fixée à 550 R° (90 °F).

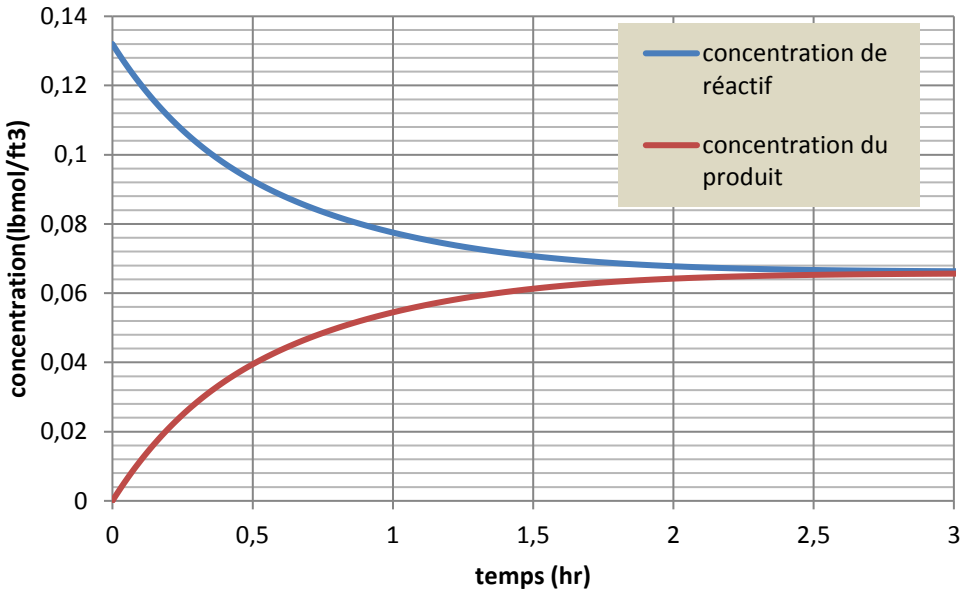


FIGURE 15.CONCENTRATION DE RÉACTIF ET PRODUITS EN FONCTION DU TEMPS

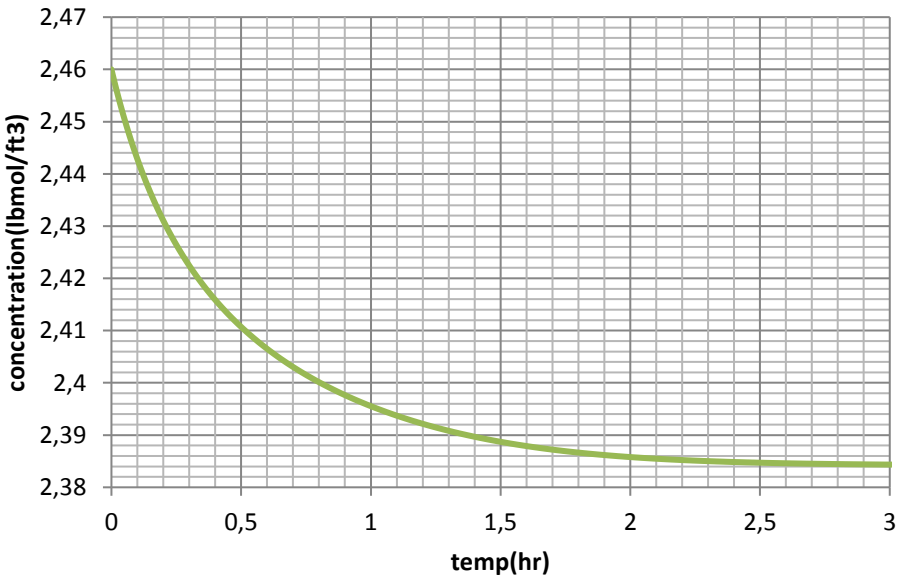


Figure 16.Concentration de l'eau en fonction du temps.

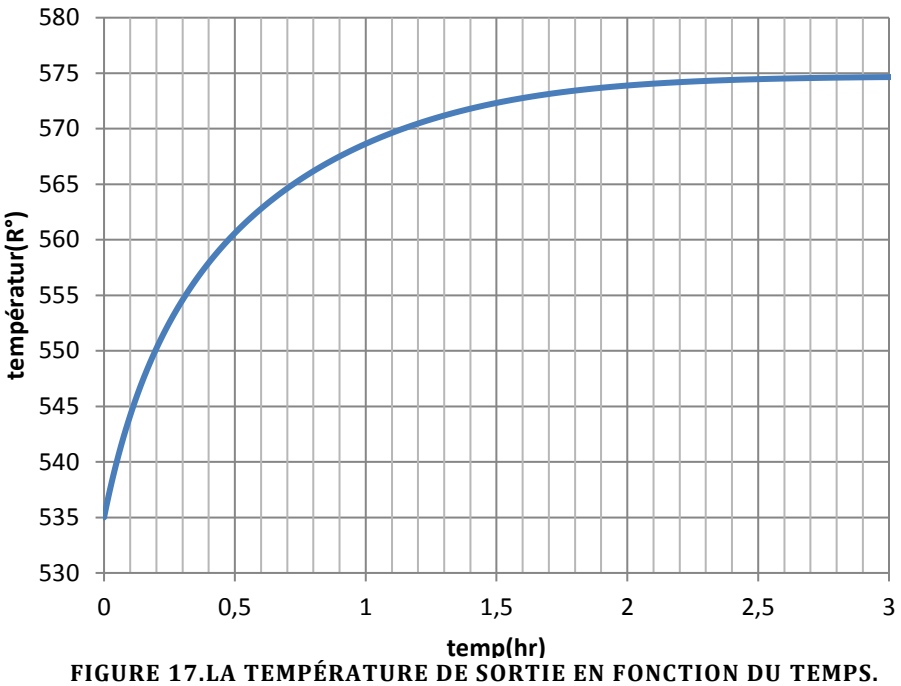


FIGURE 17.LA TEMPÉRATURE DE SORTIE EN FONCTION DU TEMPS.

On voit qu'à cette température de refroidissement, la température du réacteur se stabilise à 114 °F et le taux de conversion associé est de 49,3 %. Ces valeurs semblent être les valeurs idéales car en faisant varier la température du fluide de refroidissement aux alentours de cette valeur on observe ce qui suit : En régime permanent, plus la température de refroidissement augmente, plus la température du réacteur augmente. On reporte les valeurs ci-dessous. En contrepartie, le taux de conversion augmente. La décision dépend alors des contraintes techniques de l'appareillage et de l'aspect économique de l'opération.

TABLEAU 6 L'EVOLUTION DE LA TEMPÉRATURE DE RÉACTEUR EN FONCTION DE LA TEMPÉRATURE DE LA PAROI

T_{Paroi} (°F)	60	70	80	90	100	110	120
$T_{Réacteur}$(°F)	85,08	90,20	97,58	114.33	128.8	135.91	141.08
X	17,51	21,9	29,34	49.3	66.18	73.15	77.52

IV. 3. INFLUENCE DU PAS DE CALCUL SUR LA STABILITE DU REACTEUR.

Après plusieurs simulations, le pas choisis, qui est de **0.01 heures** semble être le plus convenable pour avoir des résultats précis. En effet, en faisant augmenter ce pas jusqu'à 0,2 heures, on ne remarque pas de grande différence au niveau des profils de température et ceux des concentrations au cours du temps comme le montre (les figures 18, 19 et 20). Cependant, en dépassant la valeur **0,20** nos résultats commencent à changer et le calcul est de moins en moins précis. Après la valeur 0,25, les résultats deviennent complètement aberrants.

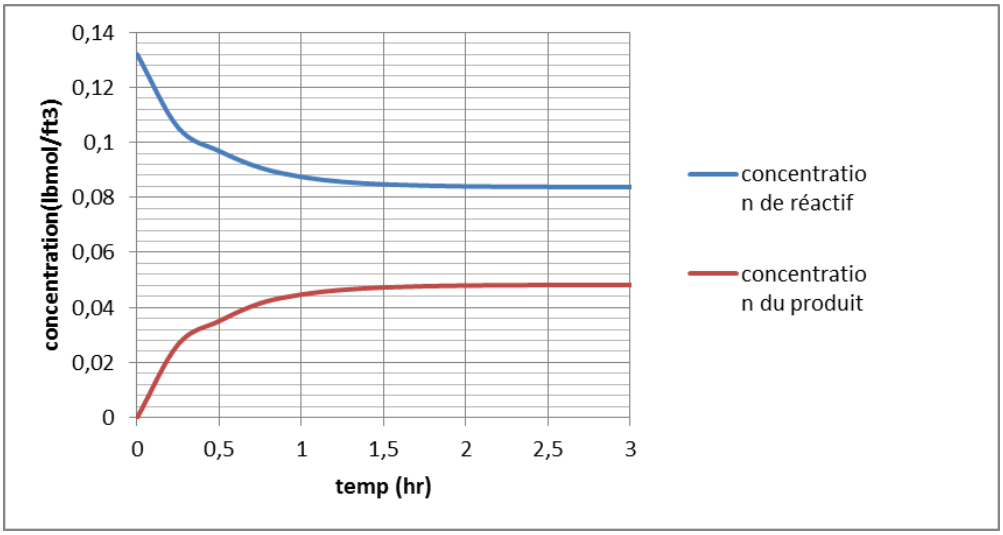


FIGURE 18 CONCENTRATION DE REACTIF ET PRODUITS EN FONCTION DU TEMPS

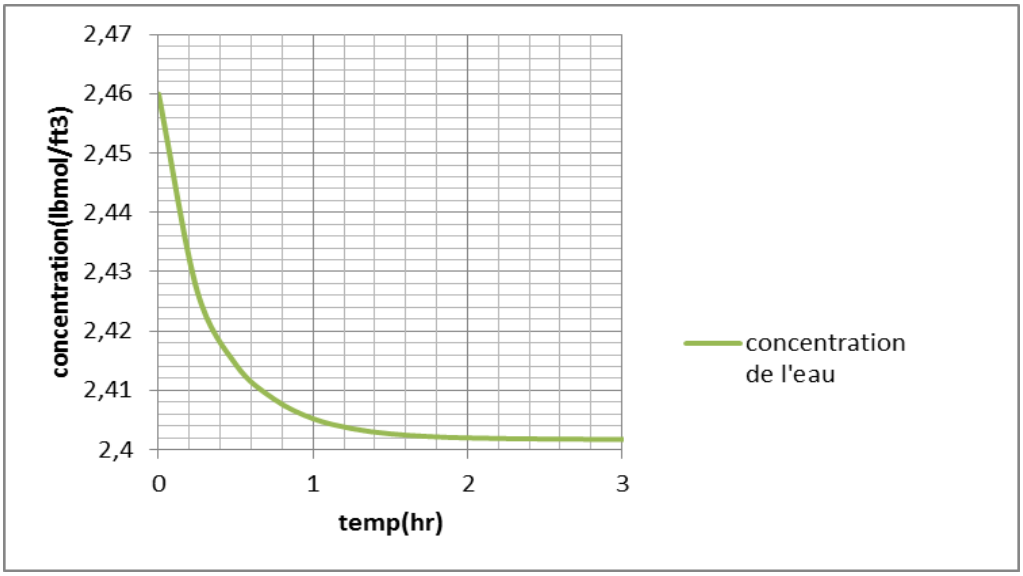


FIGURE 19 CONCENTRATION DE L'EAU EN FONCTION DU TEMPS

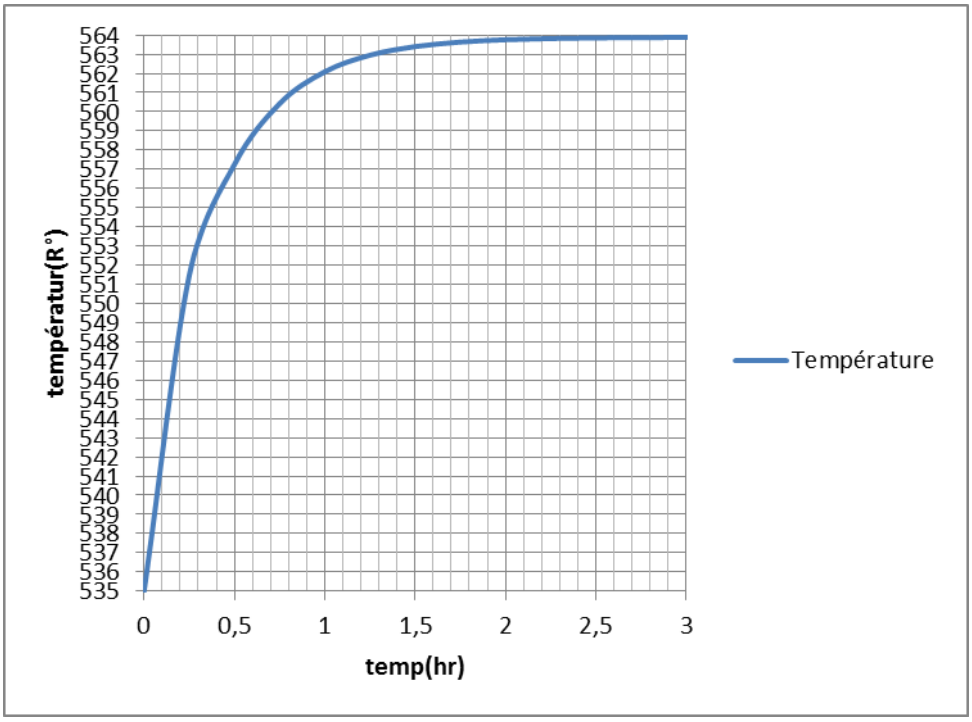


FIGURE 20 LA TEMPERATURE DE SORTIE EN FONCTION DU TEMPS.

CONCLUSION GENERALE

la presente étude a pour but de comprendre le comportement thermique d'un réacteur parfaitement agité lors de la mise en œuvre de la réaction de synthèse du propylène glycol par hydrolyse de l'oxyde de propylène à traversl'établissement d'un model représentant l'écoulement et la réaction en son sein. Le réacteur est soumis à un refroidissement à travers sa surface externe grâce à la circulation d'eau à température contrôlée dans une double enveloppe. Le modèle établi permettra de préciser les meilleurs paramètres opératoires pour ce réacteur ainsi que les limites des conditions opératoires. L'étude des bilans de matiere et des bilans énergitiquesa menés à l'établissement des équations aux deux regimes transitoire et permanent. Grace aux methodes numeriques appliquées sur les équations obtenus (Euler et Runge – Kutta de quatrième ordre) et l'emploi du logiciel Microsoft Excel, la comparaison entre les calculs theoriqueseffectués sur les deux régimes a été realisée. Dans le cas des conditions oératoires retenues, il a été établi qu'en régime permanent, le taux de conversion de l'oxyde de propylène est de 36 % et que la température du réacteur s'est stabilisée à 103 °F. La solution en régime transitoire a montré que la température du mélange réactionnel évolu initialement ensuite elle se stabilise à la même valeur calculée en régime permanent, c'est-à-dire 103 °F. La simulation a montré que le temps necessaire pour atteindre le régime permanent est d'environ 1,7 heures.

L'étude paramétrique effectuée concernant les effets de la temperature d'entrée des fluides reactifs, la temerature du fluide frigorifique et l'influence du pas de calcul a montré que tous ces paramètres exercent des effets notables.ces conditions peuvent etre étendures pour touts les réaction exothermique de premier ordres.

Finalement, Comme perspectives, il serait très intéressant d'étudier l'influence de la variation de la température dans la serpentine de la surface de refroidissement de ce réacteur et son effet sur la stabilité du system.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUE:

1. E. KOLLER. *Aide-mémoire de génie chimique, 2001, P 463-467.*

2. **J.VILLERMAUX.** *Génie de la réaction chimique : conception et fonctionnement des réacteurs, 2eme édition, Paris, 1993.*

3. A.KABOUCHE. *Modélisation et simulation d'un réacteur opérant en mode polytropique.*

4. P.TRAMBOUZE, H.LANDEGHEM ET J.P.WALIQUIR. *Les réacteur chimiques, conception, calcule , mise en œuvre. Ed. Technip, 1984.*

5. **G.TOWLER et R.SINNOTT.** *Chemical engineering design, Principals, practice and economics of plant and process design.* USA : Butterworth-Heinnemann, 2008, P 626-627.

6. M.AOUF, M.AOUMEUR.*Etude expérimental de la distribution des temps de séjour d'un réacteur catalytique a panier tournant de type Carberry. 2018.*

7.P. ANGLARET ; E.FILIPPI ; S.KAZMIERCZAK, *Technologie génie chimique, tome 2, Amiens, 1999.*

8. F. *JEDR*ZEJEWSKI. *Introduction au méthodes numériques.*

9.M. DODGE; C.STINSON, *Microsoft Excel 2013Sebastopol Microsoft press, coll "inside out" 1170,1154 p.*

10. WWW.Femto physique.fr, *cours outils pour méthodes pour la physique.*

11.*E.MARK. DAVIS*, *Methods modeling for chemical engeneering.Canada. 1984.*

12. **I.MUKHLYONOV; A.AVERBUKH; E.TUMARKINA; I.FURMER**, *the theorecal foundations of chemical technology, part I, Moscou,1964.*

13.A.KABOUCHE. *Modélisation et simulation d'un réacteur thermique -Etude de stabilité, 2012.*

14.H. SCOTT FOGLER. C.VENNEMA *elements of chemical reaction Engineering, Fourth edition. 2006.*

15. *www.metabolic-explorer.com*

16. **Laboratoire MAG QUEBEC**, *canada propylène glycol 40% avec inhibiteur de corrosion, fiche signalétique.*