**République Algérienne Démocratique et Populaire**
**Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique**

**UNIVERSITE YAHIA FARES DE MEDEA**
**Faculté de Technologie**
**Département de Génie des Procédés et Environnement**



# MEMOIRE DE MASTER

***En vue de l'obtention du Diplôme de Master en Génie des* Procédés**

***Option : Génie Chimique***

## Thème

# Simulation d'un Réacteur Continue Parfaitement Agité en Régime Stationnaire en Utilisant les Simulateurs des Procédés Aspen Plus et Aspen Hysys

**Présenté par :**

**Asmaà RAMDANI**

**Hafidha MAHDI**

**Dirigé par :**

**Dr. Chérif SI-MOUSSA**

**Promotion: 2019/2020**

# *REMERCIMENT*

*Au commencement, grâce à **ALLAH** Tout-Puissant, louez-le pour la force, la volonté, la patience et le succès grâce auxquels nous avons pu accomplir ce modèste travail, et les prières et la paix sur Son Messager, le fidèle envoyé.*

*Nos remerciements les plus profonds au **Dr. Chérif SI MOUSSA** pour sa suggestion et sa gestion, ainsi que pour ses efforts énormes et son soutien constant pour nous, appréciation et gratitude pour le grand confinement et la confiance accordés tout au long de notre projet de fin d'étude.*

*Nous adressons de même nos sincères remerciements au Président et aux membres du jury pour avoir consacré leur temps à l'étude de ce travail.*

*Nous aimerions témoigner notre gratitude à **Ms. ROUBEHIE FISSA Mohamed** et **Ms. IBRIR Abdallah** pour leurs conseils et leur coopération et aux professeurs et enseignant de la Faculté des Sciences et de technologie qui ont assuré notre formation universitaire.*

*Nos remerciements spéciaux vont du fond du cœur à nos chers parents pour tout ce qui a été fait pour nous.*

*Bien sûr, sans oublier de remercier en profondeur tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à la réalisation de ce travail.*

*MERCI*

# Dédicace

je dédie d'abord ce modeste travail à mes parents,
Ramdani Ladjel et benlarbi cherifa
pour leurs incessants encouragements, les moyens qu'ils mettent à ma disposition,
leurs extrêmes exigences, leur joie de vivre et leurs savoir-faire incommensurables. Je ferais
mon maximum pour ne pas les décevoir, à l'avenir.

**Á mes frères**: Mohamed et Yacine

**Á mes sœurs** : Nour El houda et Chiamaa

**Á mon promoteur** : Ms Cherif Si Moussa

**Á mon binome** : Mahdi hafidha

**Á l'ami fidèle** : wafa zerrouati

Sans oublier a mes collègues de la promotion 2019/2020.

À tous ceux qui me sont proches et qui me sont chers.

R.Asmaa



rawpixel



# *Dédicace*

*Je dédie ce modeste travail*
*accompagné d'un Profond amour,*
*d'abord à :*

*Allah, Mon islam, et notre noble prophète Mohamed,*

**<< ﷺ >>**

*et Mon pays bien-aimé, l'Algérie*

***A mes parents*** *qui m'ont arrosée de tendresse et d'espoirs, m'ont bénie par leurs prières, m'a encouragé toujours, J'espère qui' ils sont fièrs de moi et que je pourrai obtenir leur satisfaction, et me rendre une partie de leur grande vertu*

***A mes chers frères*** *: Sidali, Hakim, et Bachir*

***A mes sœurs*** *: Fadhila, Nadjet et Ismahane*

***A mon promoteur*** *: Dr Chérif SI MOUSSA*

***A ma chère binome*** *: Ramdani Asmaà*

*A tous mes collègues promo2019/2020 et mes très chers amis*

*A toutes les personnes que j'aime*

***M.Hafidha***

## ملخص

**محاكاة الحالة المستقرة لمفاعل خزان متقلب مستمر باستخدام محاكيات العملية Aspen Plus و Aspen Hysys**

يتضمن عمل المشروع محاكاة الحالة المستقرة لمفاعل خزان متقلب مستمر باستخدام محاكيات العملية Aspen Plus و Aspen Hysys.التفاعل الذي تم دراسته في هذا العمل هو إنتاج إيثيل بنزين باستخدام الإيثيلين والبنزين كمواد تفاعلية. هنا درسنا تأثير معدل التغذية على سلوك الحالة الثابتة CSTR وحصلنا على معدل التغذية الأمثل لزيادة التحويل والمردودية مع مراعاة ردود الفعل المتتالية حيث يكون أحد المنتجات مطلوبًا وآخر غير مرغوب فيه من أجل تقليل تكلفة الإنتاج. وبما أن تأثير درجة حرارة المفاعل كان دائماً ما يكون حاسماً في آلية التفاعل الطاردة للحرارة هذه، فقد تم تقييم القيم المثلى. كما تم تحديد الحجم الأمثل للمفاعل من خلال نتائج المحاكاة. وقدرت درجة الحرارة المثلى بـ 430 K وكان الحجم الأمثل للمفاعل100 $m^3$ في Aspen Plus و( 300 $m^3$ في Aspen Hysys مع حجم الفراغ بنسبة 60,30 ٪ ). كانت معدلات التغذية المثلى 0,4 kmol / s من البنزين و 0,2 kmol / s من الإيثيلين. يجب أن يكون الحد الأقصى لإنتاج إيثيل بنزين 49,75٪ من وزن البنزين و99,5٪ من وزن الإيثيلين.



**الكلمات المفتاحية**: محاكاة الحالة المستقرة، إنتاج إيثيل بنزين، مفاعل خزان متقلب مستمر (CSTR)، برمجيات محاكات Aspen Plus و Aspen Hysys.



## Résumé

**Simulation D'un Réacteur Continue Parfaitement Agité En Régime Stationnaire En Utilisant les Simulateurs Aspen Plus et Aspen Hysys.**

Les travaux du projet vise à la simulation d'un réacteur continue parfaitement agité en régime stationnaire en utilisant les simulateurs des procédés Aspen Plus et Aspen Hysys. La réaction étudiée dans le cadre de ces travaux était la production d'éthylbenzène utilisant de l'éthylène et du benzène comme réactifs. Ici, nous avons étudié l'effet du débit d'alimentation sur le comportement à l'état stationnaire du CSTR et obtenu un débit d'alimentation optimale afin de maximiser la conversion et le rendement avec une considération particulière des réactions consécutives où un produit était désiré et un autre était indésirables afin de minimisée le coût de production. Comme l'effet de la température du réacteur allait toujours être crucial dans ce mécanisme de réaction exothermique, des valeurs optimales ont été évaluées. Le volume optimal du réacteur a également été déterminé par les résultats de la simulation. La température optimale était estimée à 430 K et le volume optimal du réacteur était de 100 $m^3$ pour Aspen Plus et (300 $m^3$ pour Aspen Hysys avec un pourcentage de volume de vide 60,30%). Les débits d'alimentation optimaux étaient de 0,4 kmol / s de benzène et 0,2 kmol / s de l'éthylène. Le rendement maximal en éthylbenzène devrait être de 49,75% en poids de benzène et de 99,5% en poids d'éthylène.



**Les mots clés:** Simulation en régime stationnaire, Production d'éthylbenzène, Réacteur continue parfaitement agité (CSTR), Logiciels simulateurs Aspen Plus et Aspen Hysys.



## Abstract

**Steady State Simulation of a Continuous Stirred Tank Reactor Using Process Simulators Aspen Plus and Aspen Hysys.**

This project work reports steady state simulation of a continuous stirred tank reactor using process simulators Aspen Plus and Aspen Hysys**.** The reaction, investigated in this work was production of ethyl benzene using ethylene and benzene as the reactants. Here, we have studied the effect of feed flow rate on steady state behaviour of CSTR and also obtained the optimum feed flow rate in order to maximize the conversion and yield with special consideration of consecutive reactions where one product was desired and another one was undesired in order to minimize the cost of production. Since the effect of reactor temperature was always going to be crucial in this exothermic reaction mechanism, optimum values were evaluated. The optimum reactor volume was also found out from the simulation results. The optimum temperature was predicted to be 430 K and the optimum reactor volume was found to be 100 $m^3$ for Aspen plus and (300 $m^3$ for Aspen Hysys with a percentage vacuum volume 60.30%). The optimum feed flow rates were 0,4 kmol/sec benzene and 0,2 kmol/sec ethylene. The maximum yield of ethylbenzene was predicted to be 49,75% of benzene weight and 99,5% of ethylene weight.



**The key words:** Steady-state simulation, Ethylbenzene production, Continuous stirred tank reactor (CSTR), Aspen Plus and Aspen Hysys software simulators.

# SOMMAIRE

Sommaire ..... I
Abréviation ..... IV
Nomenclature ..... V
Liste des tableaux ..... VII
Liste des figures ..... IX

**Introduction générale** ..... 1

**Chapitre I : Etude bibliographique sur les réacteurs chimiques**

I.1 Introduction ..... 3
I.2 Généralités sur les réacteurs chimiques ..... 3
I.2.1 Définition d'un réacteur chimique ..... 3
I.2.2 Classification des réacteurs chimiques ..... 4
I.2.2.1 Critère de classification ..... 4
I.2.2.2 Type des réacteurs idéaux ..... 5
A. Réacteur parfaitement agité continu ..... 5
B. Réacteur parfaitement agité fermé ..... 6
C. Réacteur tubulaire à écoulement piston ..... 6
D. Réacteurs catalytiques ..... 7
I.3 Généralités sur la réaction chimique ..... 8
I.3.1 La cinétique chimique ..... 9
I.3.1.1 Vitesse de la réaction ..... 9
1.3.1.2 Les facteurs influant la vitesse de la réaction ..... 8
I.3.2 Équation de conception pour réacteur parfaitement agitée continue (CSTR) ..... 10
I.4 Bilans de matière dans les réacteurs idéaux ..... 12
I.4.1 Formulation générale ..... 12
I.4.2 Réacteur parfaitement agité continu ..... 13
I.4.3 Réacteur parfaitement agité fermé ..... 15
I.4.4 Réacteur tubulaire à écoulement piston ..... 16
I.5 Bilans énergétiques des réacteurs ..... 17
I.5.1 Formulation générale ..... 18
I.5.2 Réacteurs parfaitement agité continu ..... 18
I.5.3 Réacteurs parfaitement agité fermé ..... 19

I.5.4 Réacteurs en écoulement piston .....21
I.6 Conclusion.....22

**Chapitre II : Simulateurs de processus en génie chimique**

II.1 Introduction.....23
II.2 Approche de simulation .....23
II.2.1 Types de simulation .....23
II.2.1.1 Simulation statique .....23
II.2.1.2 Simulation dynamique.....24
II.3 Méthodes de simulation des procédés.....24
II.3.1 Simulation modulaire séquentielle .....24
II.3.1.1 Avantages et inconvénients de l'approche modulaire séquentielle.....26
II.3.2 Simulation simultanés ou d'équations orientées .....26
II.4 Simulateurs de processus chimiques.....27
II.4.1 Structure d'un simulateur de procédés.....28
II.4.2 Types de simulateurs de processus.....29
II.4.3 Objectifs des simulateurs .....30
II.5 Présentation d'Aspen PLUS et d'Aspen HYSYS .....30
II.5.1 Aspen PLUS .....30
II.5.1.1 Définition.....30
II.5.1.2 Les principales caractéristiques d'Aspen Plus .....30
II.5.2 Aspen HYSYS.....32
II.5.2.1 Définition.....32
II.5.2.2 Gestionnaire de base de simulation .....32
II.6 Conclusion .....33

**Chapitre III : Simulationd'un CSTR en régime stationnaire**

III.1 Choix des modèles.....34
III.2 Méthode appropriée......34
III.3 Choix de production .....34
III.3.1 Ethylbenzène.....34
III.4 Cinétique chimique.....34
A. Effet du débit d'alimentation.....35
B. Effet de la température du réacteur .....35

C. Effet du volume du réacteur ..... 36
III.5 Aspen plus simulation de CSTRS ..... 36
III.5.1 Configuration de la simulation ..... 36
III.5.2 Spécification des réactions ..... 45
III.5.3 Configuration du réacteur ..... 49
III.5.4 Résultats et discussion ..... 51
A. Optimisation du débit d'alimentation ..... 51
B. Optimisation de la température du réacteur ..... 54
C. Optimisation du volume du réacteur ..... 56
D. Simulation dans un réacteur CSTR en série ..... 60
E. Simulation pour un ratio de taille optimal ..... 60
F. Inférences à partir de graphiques et de tableaux ..... 63
III.6 Aspen HYSYS Simulation dans un CSTR ..... 68
III.6.1 Configuration de la simulation ..... 68
III.6.2 Spécification des réactions ..... 76
III.6.3 Configuration du réacteur ..... 77
III.6.4 Résultats et discussion ..... 81
A. Optimisation du débit d'alimentation ..... 81
B. Optimisation de la température du réacteur ..... 84
C. Optimisation du volume du réacteur ..... 86
D. Simulation dans un réacteur CSTR en séries ..... 90
E. Simulation pour un ratio de taille optimal ..... 90
F. Inférences à partir de graphiques et de tableaux ..... 94
III.7 Conclusion ..... 99
**Conclusion générale** ..... 100
**Références bibliographiques**

# LISTE DES ABREVIATIONS

| Abréviation | Signification |
|---|---|
| CSTR | « Continuous Stirred-Tank Reactor » Réacteur Chimique à Continu Parfaitement Agité |
| DEB | Di Ethyl Benzene |
| EB | Ethyl Benzene |
| RPAC | Réacteur Parfaitement Agité Continu |

# NOMENCLATURE ET SYMBOLES

| Lecture | Désignation | Unité |
|---|---|---|
| a | Le coefficient stœchiométrique de réactif A | (-) |
| b | Le coefficient stœchiométrique de réactif B | (-) |
| c | Le coefficient stœchiométrique de réactif C | (-) |
| B | Benzène | (-) |
| $C_A$ | Concentration du réactif A | Mole/$m^3$ |
| $C_B$ | Concentration du réactif B | Mole/$m^3$ |
| $C_C$ | Concentration du réactif C | Mole/$m^3$ |
| $C_D$ | Concentration du réactif D | Mole/$m^3$ |
| $C_p$ | Capacité calorifique molaire a pression constante | J/mol.k |
| d | Le coefficient stœchiométrique de réactif D | (-) |
| E | Ethylène | (-) |
| E1 & E2<br>F | Energie d'activation de réaction 1& 2<br>Débit d'alimentation | J/Kmol<br>kmol/s |
| K<br>$K_0$<br>K1 & K2 | Constante de vitesse<br>Constante cinétique<br>Constant de vitesse de réaction | (-)<br>(-)<br>(-) |
| M | La masse molaire | Kg/mol |
| $n_A$ | Nombre de mole d'un composé A | mol |
| $\dot{q}$<br>$\dot{q}_e$<br>$\dot{q}_r$<br>$\dot{q}_s$ | Puissance calorifique<br>Puissance calorifique échangé avec le milieu extérieur<br>Puissance calorifique de réaction<br>Puissance calorifique d'échauffement du mélange réactionnel | W<br>W<br>W<br>W |
| Q | Débit volumique | $m^3/s$ |
| $r_A$ | Vitesse de réaction pour le réactif A Mole/s | Mole/s |
| r | Vitesse de réaction rapportée au volume réactionnel | Mole/ $m^3/s$ |
| R | Constant des gaz parfaits | J/mol/K |
| T | Température | K |
| $T_R$ | Température de réacteur | K |
| t | Temps | S |
| $t_s$ | Temps de séjour | S |
| V | Volume du réacteur | $m^3$ |
| $X_A$ | Fraction molaire d'un composé A | (-) |

## Letters Grecques

| Lecture | Désignation | Unité |
|---|---|---|
| $vi$ | Coefficient stœchiométriques du constituant i | (-) |
| $\boldsymbol{\tau}$ | Temps de passage | S |
| $\Delta r H^0$ | Enthalpie de réacteur | J/mol |

# INDICES

| Lecture | Désignation |
|---|---|
| *e* | Entrée du réacteur |
| *ext* | Externe |
| *m* | L'ordre partiel de la réaction au cours du temps pour B |
| *n* | L'ordre partiel de la réaction au cours du temps pour A |
| *r* | Réaction |
| *s* | Sortie du réacteur |

# LISTE DES TABLEAUX


| Tableau | Titre du tableau | Page |
|---|---|---|
| | **CHAPITRE I** | |
| Tableau I-1 | Types des réacteurs chimiques et leurs critères de classification | 4 |
| Tableau I-2 | Types des réacteurs chimiques rencontrés en pratique | 8 |
| | **CHAPITRE II** | |
| Tableau II-1 | Aspen Plus et Aspen HYSYS vs autres logiciels concurrents | 29 |
| | **CHAPITRE III** | |
| Tableau III-1 | Comparaison entre le débit d'alimentation et le débit de produit | 51 |
| Tableau III-2 | Comparaison entre le débit d'alimentation et la fraction molaire du produit | 52 |
| Tableau III-3 | Comparaison entre le débit de benzène avec la fraction molaire de di-éthylbenzène | 53 |
| Tableau III-4 | Comparaison entre la température du réacteur et le débit du produit | 54 |
| Tableau III-5 | Comparaison entre la température du réacteur et la fraction molaire du produit | 54 |
| Tableau III-6 | Comparaison entre la température du réacteur avec la fraction molaire de di-éthylbenzène | 55 |
| Tableau III-7 | Comparaison entre le volume du réacteur et le débit du produit | 57 |
| Tableau III-8 | Comparaison entre le volume du réacteur et la fraction molaire du produit | 57 |
| Tableau III-9 | Comparaison du volume du réacteur avec la fraction molaire de di-éthylbenzène | 58 |
| Tableau III-10 | Résultant de flux pour la simulation d'état stable | 59 |
| Tableau III-11 | Comparaison entre les volumes du réacteur et le débit de produit | 61 |
| Tableau III-12 | Comparaison entre les volumes du réacteur et la mole de produit de R1 et R2 | 61 |
| Tableau III-13 | Comparaison entre R1 volume ($m^3$) et formation de DEB dans R1 et R2 | 62 |
| Tableau III-14 | Comparaison entre R2 volume ($m^3$) et formation de DEB dans R1 et R2 | 63 |
| Tableau III-15 | Résultant de flux pour la simulation CSRT en série | 64 |
| Tableau III-16 | Comparaison entre la température du réacteur et la conversion et le rendement | 61 |
| Tableau III-17 | Comparaison entre le volume du réacteur et la conversion et le rendement | 65 |
| Tableau III-18 | Comparaison entre le débit d'alimentation vs la conversion et le rendement | 66 |
| Tableau III-19 | Comparaison entre le débit d'alimentation et le débit de produit | 81 |
| Tableau III-20 | Comparaison entre le débit d'alimentation et la fraction molaire du produit | 81 |
| Tableau III-21 | Comparaison entre le débit de benzène avec la fraction molaire de di-éthylbenzène | 83 |
| Tableau III-22 | Comparaison entre la température du réacteur et le débit du produit | 84 |
| Tableau III-23 | Comparaison entre la température du réacteur et la fraction molaire du produit | 84 |
| Tableau III-24 | Comparaison entre la température du réacteur avec la fraction molaire de di-éthylbenzène | 85 |
| Tableau III-25 | Comparaison entre le volume du réacteur et le débit de la production | 87 |
| Tableau III-26 | Comparaison entre le volume du réacteur et la fraction molaire du produit | 87 |
| Tableau III-27 | Comparaison entre le volume du réacteur avec la fraction molaire de di-éthylbenzène | 88 |
| Tableau III-28 | Résultant de flux pour la simulation d'état stable | 89 |
| Tableau III-29 | Comparaison entre les volumes du réacteur et le débit de produit de R1 et R2 | 91 |

| | | |
|---|---|---|
| Tableau III-30 | Comparaison entre les volumes du réacteur et la mole de produit de R1 et R2 | 91 |
| Tableau III-31 | Comparaison entre R1 volume ($m^3$) et formation de DEB dans R1 et R2 | 93 |
| Tableau III-32 | Comparaison entre R2 volume ($m^3$) et formation de DEB dans R1 et R2 | 94 |
| Tableau III-33 | Résultant de flux pour la simulation CSRT en série | 95 |
| Tableau III-34 | Comparaison entre la température du réacteur et la conversion et le rendement | 96 |
| Tableau III-35 | Comparaison entre le volume du réacteur et la conversion et le rendement | 97 |
| Tableau III-36 | Comparaison entre le débit d'alimentation vs la conversion et le rendement | 97 |

# LISTE DES FIGURES


| Figure | Titre de la figure | Page |
|---|---|---|
| | **CHAPITRE I** | |
| Figure I-1 | Schéma de principe d'un réacteur parfaitement agité continu avec surface d'échange | 5 |
| Figure I-2 | Schéma de principe d'un réacteur parfaitement agité continu | 6 |
| Figure I-3 | Schéma de principe d'un réacteur agité fermé | 6 |
| Figure I-4 | Schéma réacteurs piston tubulaires | 7 |
| Figure I-5 | Facteurs gouvernants le calcul de réacteur | 12 |
| Figure I-6 | Réacteur parfaitement agité continu | 13 |
| Figure I-7 | Variation de 1/r en fonction du taux de conversion | 14 |
| Figure I-8 | Réacteur tubulaire à écoulement piston | 16 |
| Figure I-9 | Réacteur parfaitement agité continu | 18 |
| Figure I-10 | Réacteur fermé | 19 |
| Figure I-11 | Réacteur en écoulement piston | 21 |
| | **CHAPITRE II** | |
| Figure II-1 | Architecture logicielle de simulation d'une équation-Orientée | 27 |
| Figure II-2 | Architecture des simulateurs de procédés | 28 |
| | **CHAPITRE III** | |
| Figure III-1 | Simulation Open Aspen Plus | 36 |
| Figure III-2 | Fenêtre Aspen Plus avec feuille de flux | 37 |
| Figure III-3 | Spécification des unités | 37 |
| Figure III-4 | Sélection du composant éthylène | 38 |
| Figure III-5 | Le benzène (B), l'éthylène (E) et l'éthylbenzène (EB), le méta-diéthylbenzène (DEB) sont ajoutés comme composants | 38 |
| Figure III-6 | Méthode de sélection des propriétés physiques | 39 |
| Figure III-7 | Méthode Chao-Seader choisie | 39 |
| Figure III-8 | Types des réacteurs | 40 |
| Figure III-9 | Placer RCSTR sur le schéma | 40 |
| Figure III-10 | Installation des vannes | 41 |
| Figure III-11 | Feuille de calcul avec équipement installé | 41 |
| Figure III-12 | Installation du flux de matériaux | 42 |
| Figure III-13 | Diagramme final | 42 |
| Figure III-14 | Propriétés du flux d'admission de benzène liquide en termes de T, P et de débit de composition | 43 |
| Figure III-15 | Propriétés du flux d'entrée de gaz d'éthylène en termes de T, P et de débit de composition | 43 |
| Figure III-16 | Spécifications d'entrée « VALVE1» et «VALVE2» où la chute de pression est réglée à 10 atm de sorte que la pression de sortie soit égale à celle du réacteur | 44 |
| Figure III-17 | Spécifications du bloc « VALVE3 », où une chute de pression est réglée sur 5 atm | 44 |
| Figure III-18 | Configuration des réactions | 45 |
| Figure III-19 | Taux de réaction selon la loi de puissance | 45 |
| Figure III-20 | Spécification du type de réaction | 46 |
| Figure III-21 | Spécification des réactifs et des produits pour la première réaction | 46 |
| Figure III-22 | Spécification des réactifs et des produits pour les deuxièmes et troisièmes réactions | 47 |

| | | |
|---|---|---|
| Figure III-23 | Spécification des paramètres cinétiques pour la réaction 1 | 48 |
| Figure III-24 | Spécification des paramètres cinétiques pour la réaction 2 | 48 |
| Figure III-25 | Spécification des paramètres cinétiques pour la réaction 3 | 49 |
| Figure III-26 | Configuration des conditions et de la taille du réacteur | 49 |
| Figure III-27 | Sélection de la réaction R-1 | 50 |
| Figure III-28 | Exécution de la simulation | 50 |
| Figure III-29 | Résultats de flux | 51 |
| Figure III-30 | Débit d'alimentation vs débit de produit | 52 |
| Figure III-31 | Débit d'alimentation vs fraction molaire du produit | 52 |
| Figure III-32 | Débit de benzène (kmol/s) en fonction de la fraction molaire du produit (DEB) | 53 |
| Figure III-33 | Température du réacteur vs débit du produit | 55 |
| Figure III-34 | Température du réacteur vs fraction molaire du produit (DEB) | 56 |
| Figure III-35 | Volume du réacteur vs débit du produit | 57 |
| Figure III-36 | Volume du réacteur vs DEB | 58 |
| Figure III-37 | Schéma de principe pour la série CSTR | 60 |
| Figure III-38 | R1 et courbes de débit de produit | 61 |
| Figure III-39 | R2 et courbes de débit de produit | 62 |
| Figure III-40 | Tracé entre le volume du réacteur R1 vs DEB | 62 |
| Figure III-41 | Tracé entre le volume du réacteur R2 vs DEB | 63 |
| Figure III-42 | Tracé entre la température du réacteur et la conversion de B & E | 65 |
| Figure III-43 | Tracé entre le volume du réacteur et le rendement de B & E | 66 |
| Figure III-44 | Tracé entre le débit d'alimentation en fonction de la conversion et du rendement | 66 |
| Figure III-45 | Démarrage d'Aspen HYSYS | 68 |
| Figure III-46 | New Simulation Open Aspen HYSYS | 68 |
| Figure III-47 | Fenêtre Aspen HYSYS avec feuille de flux | 69 |
| Figure III-48 | Sélection du composant benzène | 69 |
| Figure III-49 | Le benzène, l'éthylène et l'éthylbenzène, le diéthylbenzène sont ajoutés comme composants | 70 |
| Figure III-50 | Méthode de sélection des propriétés physiques | 70 |
| Figure III-51 | Méthode Chao Seader choisie | 71 |
| Figure III-52 | Spécification des unités | 71 |
| Figure III-53 | Types des réacteurs | 72 |
| Figure III-54 | Placer RCSTR sur le schéma | 72 |
| Figure III-55 | Installation mixeur et des vannes | 73 |
| Figure III-56 | Installation du flux de matériaux | 73 |
| Figure III-57 | Propriétés du flux d'admission de benzène gazeux en termes de T, P et de débit de composition | 74 |
| Figure III-58 | Propriétés du flux d'admission d'éthylène liquide en termes de T, P et de débit de composition | 74 |
| Figure III-59 | Propriétés du flux d'admission d'éthylène liquide en termes de T, P et de débit de composition | 74 |
| Figure III-60 | Spécifications d'entrée et de sortie « VALVE1 »,« VALVE2 » et « VALVE3 » | 75 |
| Figure III-61 | Spécifications d'entrée « VALVE1 » et « VALVE2 », « VALVE3», où la chute de pression est réglée à 5 atm de sorte que la pression de sortie soit égale à celle du réacteur | 75 |
| Figure III-62 | Configuration des réactions avec type de réaction | 76 |
| Figure III-63 | Spécification des réactifs et des produits pour la première réaction | 76 |

| | | |
|---|---|---|
| Figure III-64 | Spécification des réactifs et des produits pour les deuxièmes et troisièmes réactions | 76 |
| Figure III-65 | Spécification des courants d'entrée et de sortie du réacteur | 78 |
| Figure III-66 | Configuration des conditions et de la taille du réacteur | 78 |
| Figure III-67 | Spécification des paramètres cinétiques pour les trois réactions dans le réacteur | 79 |
| Figure III-68 | Spécification de température de réacteur | 79 |
| Figure III-69 | Spécification de Mixer pour obtenir les résultats finals | 80 |
| Figure III-70 | Diagramme final | 80 |
| Figure III-71 | Résultats de flux | 80 |
| Figure III-72 | Débit d'alimentation vs débit de produit | 82 |
| Figure III-73 | Débit d'alimentation vs fraction molaire du produit | 82 |
| Figure III-74 | Débit de benzène (kmol/s) en fonction de la fraction molaire du produit (DEB) | 83 |
| Figure III-75 | Température du réacteur vs débit du produit | 85 |
| Figure III-76 | Température du réacteur vs fraction molaire du produit (DEB) | 86 |
| Figure III-77 | Volume du réacteur vs débit du produit | 87 |
| Figure III-78 | Volume du réacteur vs DEB | 88 |
| Figure III-79 | Schéma de principe pour la série CSTR | 90 |
| Figure III-80 | R1 et courbes de fraction molaire | 92 |
| Figure III-81 | R2 et courbes de la fraction molaire de produit | 92 |
| Figure III-82 | Tracé entre le volume du réacteur R1 vs DEB | 93 |
| Figure III-83 | Tracé entre le volume du réacteur R2 vs DEB | 94 |
| Figure III-84 | Tracé entre la température du réacteur et la conversion de B & E | 96 |
| Figure III-85 | Tracé entre le volume du réacteur et le rendement de B & E | 97 |
| Figure III-86 | Tracé entre le débit d'alimentation en fonction de la conversion et du rendement | 98 |

# INTRODUCTION GÉNÉRALE

Depuis longtemps, la production dans l'industrie chimique a été fondée principalement sur les expériences. Cependant, l'utilisation des méthodes de simulation est devenue indispensable, afin d'éviter ou de réduire le coût de ces expériences, vu que nous faisons souvent face à des conditions très difficiles de température et de pression, sans oublier les efforts et le temps fournit par les manipulateurs dans ce domaine. Le développement remarquable des outils informatiques a également aidé beaucoup de chercheurs et d'industriels, de penser à travailler par les méthodes de simulation à travers des modèles mathématiques appliquées dans des logiciels sophistiqués, qui permettent de prédire les paramètres liés à la production sans faire des expériences, et aussi comprendre l'effet de changement de ces paramètres sur une ou plusieurs réponses à étudier**[1]**.

Le réacteur chimique est le cœur principal de tous les procédés chimiques. En effet les réacteurs agités continu ont une place importante dans l'achèvement de ces procédés. Afin de satisfaire les exigences du marché et les demandes croissantes des clientèles, les industries en génie des procédés sont obligées d'améliorer continuellement ses opérations et ses installations industrielles, ce qui à son tour d'affectées des améliorations sur la productivité et la rentabilité des différentes opérations de productions. En plus des objectifs d'optimisation des conditions de production ; l'assurance du fonctionnement des installations et la protection de l'environnement et du personnel doivent également être garanties. Pour faire face à ces problématiques on fait appel dans ce travail à la simulation des réacteurs chimiques qui occupent une place très importante dans l'ingénierie et l'industrie chimique.

L'objectif de ce travail est d'utiliser les capacités des simulateurs des procédés, tels que les simulateurs : *Aspen plus*, *Aspen Hysys* et *PRO II* pour faire la simulation des réacteurs idéaux. Dans notre travail on utilise les deux simulateurs : *Aspen plus* et *Aspen Hysys* comme des outils puissants pour faire des simulations sur un procédé chimique dans un réacteur de type CSTR.

Le présent travail s'articule essentiellement autour de trois (03) chapitres où :

- Le premier chapitre : Comprend une étude bibliographique sur les réacteurs chimiques, nous avons couvert des généralités et des notions de base liées à ce sujet, telles que les réactions chimiques, les bilans de matière et les bilans énergétiques dans les réacteurs idéaux.
- Le deuxième chapitre : Est dédié à l'étude des simulateurs des processus en génie chimique, nous avons donné un aperçu sur l'approche générale de la simulation, leurs différents types, les architectures possibles, et enfin les méthodes de simulation des procédés, nous nous appuierons particulièrement sur les simulateurs *Aspen Plus* et *Aspen Hysys*.

- Le troisième chapitre : Sera consacré à l'application d'une simulation Réelle par les deux simulateurs *Aspen Plus* et *Aspen Hysys*, où le choix de systèmes à étudier s'est porté sur la simulation d'un réacteur CSTR afin de déterminer son comportement en régime stationnaire, puis étudier la stabilité des différents points de fonctionnement possibles pour ce type de réacteur. Nous allons mener une étude sur la production d'éthylbenzène dans un ensemble de réacteur à cuve agitée continu (CSTR).

Enfin nous terminerons ce travail par une conclusion générale qui résume les principaux résultats obtenus et donne quelques perspectives qui seront un guide de référence pour les prochains travaux effectués dans cet axe de recherche.

# CHAPITRE I
# ETUDE BIBLIOGRAPHIQUE SUR LES RÉACTEURS CHIMIQUES

## I.1 Introduction

Le génie des procédés peut être défini comme la science pour l'ingénieur dont l'objet et la mise en œuvre optimale des procédés de transformation physico-chimique et/ou biologique des matières premières en produits fonctionnels. L'une des branches importantes du génie des procédés est le génie de la réaction chimique, qui s'intéresse aux méthodes de mis en œuvre rationnelle des transformations chimiques et en particulier aux appareils dans lesquels sont conduites les réactions : les réacteurs chimiques. Même si le réacteur ne présente qu'une part modeste de l'investissement dans un procédé industriel, son fonctionnement conditionne en grande partie les installations placées en amont (préparation des charges de réactif, choix des conditions de température et de pression) et les installations situées en aval (dispositif de séparation des produits notamment). Une amélioration du rendement du réacteur du quelques unités peut donc se traduit par un abaissement notable des coûts d'investissement et des consommations de matière et d'énergie **[1]**.

## I.2 Généralités sur les réacteurs chimiques

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 **[1].**

### I.2.1 Définition d'un réacteur chimique

Un réacteur chimique est tout appareillage permettant de réaliser une réaction chimique, c'est-à-dire de transformer des espèces moléculaires en d'autres espèces moléculaires.

Le fonctionnement d'un réacteur (conversion, distribution des produits) conditionne en grande partie la nature des installations de préparation de la charge et de séparation des produits. Un gain en conversion ou en sélectivité du réacteur peut conduire à supprimer une colonne à distiller aval. La conception et l'optimisation du réacteur doivent donc faire l'objet d'une étude attentive. En ce sens, on peut dire que le réacteur est véritablement le cœur du procédé, qui requiert toute l'attention de l'ingénieur **[3]**.

## I.2.2 Classification des réacteurs chimiques

D'une manière très large, on peut dire qu'un réacteur chimique est tout portion d'espace ou peut avoir lien une transformation chimique.

Il existe diverses manières de réaliser pratiquement une réaction chimique pour l'étudier fondamentalement au laboratoire ou pour l'exploiter industriellement.

Plusieurs critères de classement des réacteurs sont possibles, suivant le point de vue auquel on se place **[4]**.

### I.2.2.1 Critère de classification

Le Tableau (Tableau I.1) rassemble les types des réacteurs chimiques, et leurs critères de classification **[3]**.

**Tableau I-1 :** Types des réacteurs chimiques et leurs critères de classification.

| Critère | Type de Réacteur | Examples industrials |
|---|---|---|
| Circulation du mélange réactionnel | Réacteur fermé ( pas d'échange de matière avec le milieu extérieur ) | Polymérisation en discontinu, chimie fine |
| | Réacteur semi-fermé ( une partie de la charge est ajoutée ou extraite en cours d'opération ) | Chlorations organique de petits produits |
| | Réacteur ouvert ( la charge circule dans le réacteur ) | Synthèse et traitement des intermédiaires pétrochimique de gros tonnage |
| Evolution dans le temps | Fonctionnement en régime transitoire | Operations discontinue, démarrage des réacteurs continus |
| | Fonctionnement en régime permanent | Marche continue des réacteurs ouverts |
| Degrés de mélange des substances en réaction ( cas extrêmes ) | Réacteur parfaitement agité ( composition uniforme , mélange parfait) | Sulfonations, nitrations, Polymérisations |
| | Réacteur en écoulement piston ( progression de la charge en bloc sans mélange entre tranches successives ) | Réacteur catalytique tubulaires à lit fixe. Réacteurs tubulaires homogènes en régime turbulent |
| Mise au contact des phases | Co-courant | Hydrodésulfuration catalytique |
| | Contre-courant | Adsorption réacteur d'un gaz dans un réacteur à ruissellement |

### I.2.2.2 Type des réacteurs idéaux

## A. 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 **[1]**.

On peut classer ce type de réacteur selon le régime thermique en trois 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 du régulation de la température, pour éviter un fonctionnement exotique **[1]**.

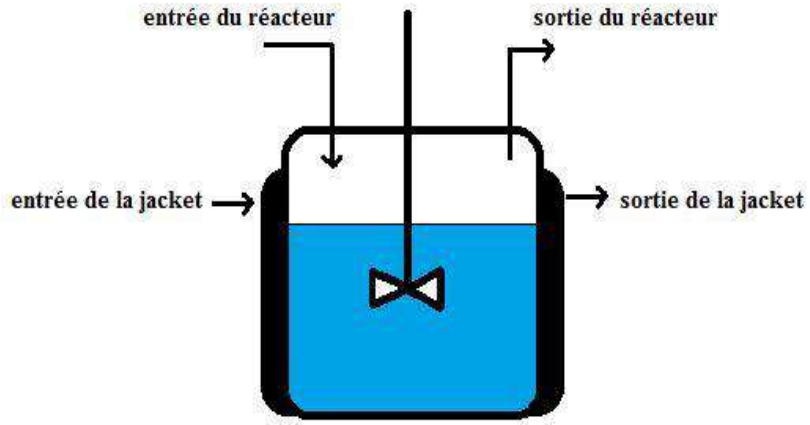



**Figure I-1:** Schéma de principe d'un réacteur parfaitement agité continu avec surface d'échange **[1]**.

- **Réacteur parfaitement agité continu isotherme**

Correspond à un fonctionnement stationnaire du réacteur ou la température et tous les autres variables sont constant **[1]**.

- **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.

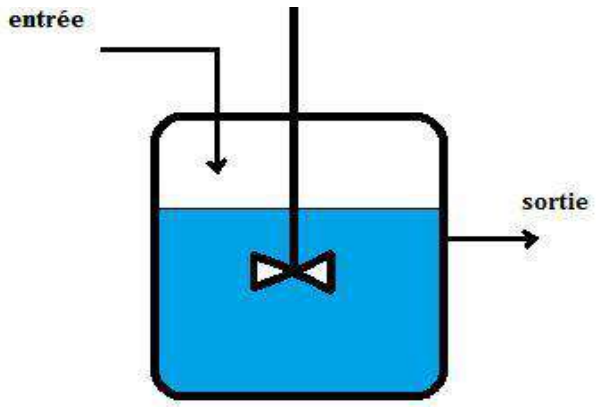



**Figure I-2 :** Schéma de principe d'un réacteur parfaitement agité continu **[1]**.

## B. 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 **[1]**.

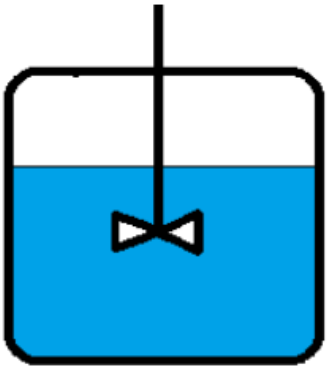


**Figure I-3 :** Schéma de principe d'un réacteur agité fermé **[1]**.

## C. Réacteur tubulaire à écoulement piston

Les hypothèses liées au modèle du réacteur piston (en Anglais : PFTR: Plug Flow Tubulaire Réacteur) sont les suivantes:

- Le mélange radial est considéré comme parfait.
- L'écoulement est de type piston.
- La densité est constante **[3]**.

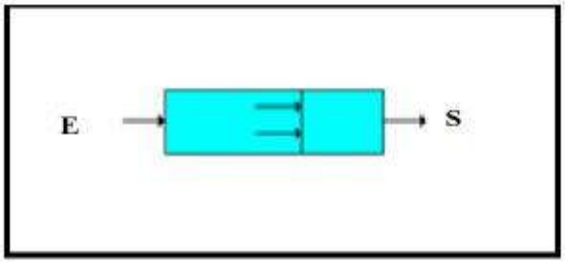



**Figure I-4 :** Schéma réacteurs piston tubulaires **[3]**.

## D. Réacteurs catalytiques

Parmi les réacteurs polyphasiques, 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 **[1]**.

On distingue trois types principaux de réacteurs catalytiques: à lit fixe, à lit mobile et à lit fluidisé.

- **Réacteurs à lit fixe**

Dans un réacteur à lit fixe, le catalyseur de forme solide (particules sphériques ou cylindriques de 1 à 5 mm) est disposé en général dans des tubes de plusieurs mètres de long ou même de plusieurs dizaines de mètre. Le fonctionnement (pour une bonne rentabilité le catalyseur doit durer des milliers d'heures) est assuré jusqu'à ce que le catalyseur soit épuisé.
Si le lit de catalyseur est constitué par un seul tube (l'enveloppe du réacteur) le réacteur est dit à lit fixe adiabatique **[5]**.

- **Réacteurs à lit mobile**

Les réacteurs à lit mobile ont un lit de catalyseur en mouvement; c'est-à-dire le catalyseur s'écoule à co-courant ou à contre-courant. Ce type de réacteur permet ainsi la régénération du catalyseur en continu mais les applications sont limitées (phénomène d'usure des grains de catalyseur par frottement) **[5]**.

- **Réacteurs à lit fluidisé**

La technique du lit fluidisé, dans laquelle le catalyseur en particules très fines est rendu fluide par entraînement avec les réactifs, présente des avantages dans les deux cas suivants:

- Lorsque l'appareil requiert une élimination ou un apport important de chaleur.
- Lorsqu'il est nécessaire de régénérer fréquemment le catalyseur.

Parmi les applications, on cite le craquage catalytique **[5]**.

**Tableau 1-2 :** Types des réacteurs chimiques rencontrés en pratique **[1]**.

| Phases en présence | | Mode d'opération | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| | | Discontinu | Continu | | |
| | | | Tubulaire | étagé | Parfaitement agité |
| Mono phasiques | Gaz | / | Vapocraquage | / | / |
| | liquide | Polymérisation en solution | Fabrication urée | Polymérisation en solution | Estérification |
| Poly phasiques | Gaz + Liquide | Fermentation | Tour d'absorption de $CO_2$ et $H_2S$ | Oxydation du cyclohexane | Traitement biologique des eaux |
| | Liquide + Liquide | Sulfonation d'aromatiques par l'oléum | Hydrolyse d'esters | Polymérisation en émulsion | Nitration d'aromatiques |
| | Fluides + Solide (catalyseur) | Hydrogénations avec catalyseur en suspension | Lit fixe Lit mobile | Lit fluide à étages | Lit fluide catalyseur en suspension |
| | Fluides + Solides | Régénération d'un catalyseur par brulage | Lit mobile (haut fourneau) | Grillage de minerais | Combustion en lit fluidisé |

## I.3 Généralités sur la réaction chimique

Une réaction chimique correspond à la transformation d'espèces chimiques (molécules, atomes ou ions) en d'autres espèces chimiques. Au cours d'une réaction chimique les noyaux des éléments chimiques ne sont pas modifiés, seuls participent les électrons des niveaux externes des atomes **[1]**.

### I.3.1 La cinétique chimique

La cinétique chimique permet de définir des lois d'avancement des réactions en

fonction du temps de séjour des réactifs au sein du réacteur. L'introduction de ce paramètre temps est essentiel pour définir le volume réactionnel nécessaire à la réalisation d'une transformation chimique jusqu'à un avancement donné **[1]**.

## I.3.1.1 Vitesse de la réaction

La vitesse d'une réaction chimique est la quantité de matière transformée (ou formée ) par unité de temps et par unité d'une extensives que dépend de la réaction considérée : volume (réactions homogènes ), masse ou surface ( réactions de catalyse hétérogène) , etc. la vitesse mesure donc un débit spécifique de transformation chimique **[6]**.

$$\mathrm{r} = \frac{1}{v}\frac{\mathrm{dn}}{dt} \qquad \text{(I.1)}$$

$\frac{\mathrm{dn}}{dt}$ : est la vitesse d'apparition (ou disparition) de l'espèce Ai en fonction du temps.

### 1.3.1.2 Les facteurs influant la vitesse de la réaction

Les paramètres qui influencent directement sur l'évolution d'un système chimique sont

- Les concentrations initiales des réactifs
- La température
- La présence d'un catalyseur

- **Influence de la concentration sur la vitesse de la réaction**

Il a été constaté expérimentalement que la vitesse peut se mettre sous forme d'un monôme de concentrations instantanées des réactifs.

En effet si on considère l'équation stœchiométrique **[7].**

$$aA + bB \Rightarrow cC + dD \qquad \text{(I.2)}$$

On peut écrire

$$r_A = -\frac{1}{a}\frac{dc_A}{dt} = kC_A^n C_B^m \qquad \text{(I.3)}$$

- **Influence de la température (la loi d'Arrhenius)**

L'effet de la température obéit à une relation presque générale. En effet pour presque toutes les réactions la vitesse de réaction croit d'une manière exponentielle avec la température.

La constante de vitesse k d'une réaction dont l'unité dépend de l'ordre de la réaction, varie avec la température, en première approximation selon la loi d'Arrhenius **[7]**.

$$k = k_0\, exp\left(\frac{-E}{RT}\right) \tag{I.4}$$

## I.3.2 Équation de conception pour réacteur parfaitement agitée continue (CSTR)

**Réactions consécutives**

La configuration du réacteur devient d'autant plus fortifiante que le rendement et en plus le changement doit être considéré. Une circonstance normale dans laquelle cela se produit est quand il y a des réponses irréversibles, par exemple, l'accompagnement **[2]**.

$$A + B \rightarrow C \tag{I.5}$$

$$C + B \rightarrow D \tag{I.6}$$

L'article recherché est C. L'article indésirable est D. Il existe de nombreuses mécaniques critiques illustrations de ce type: chloration, oxydation et nitration d'un assortiment d'hydrocarbures. Les taux de réponse particuliers pour les premières et deuxièmes réponses sont K1 et K2, séparément

$$\begin{pmatrix}\text{La « conversion» du réactif A}\\ \text{est définie comme}\\ \text{conversion de A}\end{pmatrix} = \left(\begin{pmatrix}\text{moles A}\\ \text{alimentées}\end{pmatrix} - \begin{pmatrix}\text{moles A}\\ \text{quittant le réacteur}\end{pmatrix}\right) / \begin{pmatrix}\text{moles A}\\ \text{alimentées}\end{pmatrix}$$

Il existe plusieurs façons de définir le « rendement » (ou la « sélectivité ») du produit souhaité C. L'une est sur la base de la quantité de A alimenté. L'autre est basé sur la quantité de A qui a réagi.

$$\text{Rendement 1} = (\text{moles C produites}) / (\text{moles A alimentées}) \tag{I.7}$$

$$\text{Rendement 2} = (\text{moles C produites}) / (\text{moles A réagi}) \tag{I.8}$$

Le produit souhaitable C est produit par la première réaction dont la vitesse dépend de la concentrations de A et B dans le réacteur. Mais C est consommé par la deuxième réaction dont le taux dépend des concentrations de C et B dans le réacteur **[2]**.

$$R_C = -k_1 C_A C_B + k_2 C_C C_B$$

$$= C_A C_B k_{01} e^{-(E_1/RT_R)} + C_C C_B k_{02} e^{-(E_2/RT_R)} \tag{I.9}$$

$$R_D = -k_2 C_C C_B$$
$$= C_C C_B k_{02} e^{-(E_2/RT_R)} \quad (I.10)$$

Ou les taux de réaction $\mathbf{R_C}$ et $\mathbf{R_D}$ sont des taux de consommation.

Il est évident que la meilleure approche pour décrire ce réacteur est de maintenir la concentration de C et de B pour garder le deuxième taux de réponse. Ceci implique qu'une grande abondance de réactif A devrait à être utilisé dans le cadre du réacteur, ce qui affaiblira la concentration de C et de B. Il également aidé à conduire la première réponse en vue de l'énorme estimation de $C_A$ indépendamment de la petite estimation de $C_B$. Avec ce plan, la transformation de chaque passage de A sera peu, cependant le rendement de C chaque mole de A répondue sera énorme **[2]**.

L'inconvénient de cette configuration est que la surabondance Une nécessité absolue soit récupérée et réutilisée, ce qui implique des coûts de capital et de vitalité élevés. Quoi qu'il en soit, la variation subséquente du rendement de C est régulièrement définitivement justifiée, même en dépit de la dépense incluse. Cela est particulièrement vrai lorsque l'élément indésirable D est mortel, destructeur, instable ou une toxine écologique difficile à éliminer. Les préoccupations liées à la nature et au bien-être ont poussé les grandes lignes de nombreux plans d'action composés à intégrer quelques flux de réutilisation expansifs de sorte que les rendements des articles attrayants soient augmentés et que les rendements des articles indésirables soient diminués. Ces flux de réutilisation créent le problème du contrôle à l'échelle de la centrale Il y a quatre composantes, donc quatre composantes peuvent être écrites **[2].**

Solde de la composante A (kmol A/s) :

$$F_{A_0} C_{A_0} = F C_A + V_R k_1 C_A C_B \quad (I.11)$$

Solde des composantes B (kmol B/s) :

$$F_{B_0} C_{B_0} = F C_B + V_R (k_1 C_A C_B + k_2 C_C C_B) \quad (I.12)$$

Solde de la composante C (kmol C/s) :

$$0 = F C_C + V_R (-k_1 C_A C_B + k_2 C_C C_B) \quad (I.13)$$

Solde des composantes D (kmol D/s) :

$$0 = FC_D - V_R k_2 C_C C_B \quad (I.14)$$

## I.4 Bilans de matière dans les réacteurs idéaux

Dans cette partie, nous allons développer les équations de bilan qui 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. Jointes aux équations de bilan énergétique, ou à la connaissance des variables physiques (pression, température), les équations de bilan de matière permettent de calculer l'avancement des réactions qui ont lieu dans le réacteur.

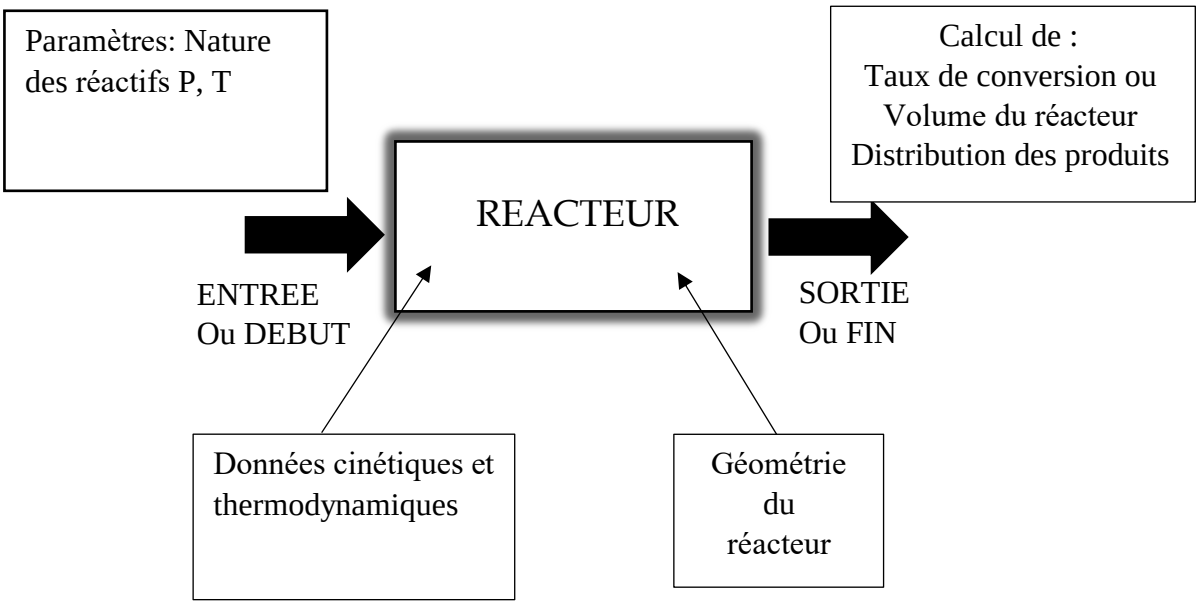



**Figure I-5** : Facteurs gouvernants le calcul de réacteur **[8]**.

### I.4.1 Formulation générale

Considérons une zone réactionnelle d'une transformation chimique d'un constituant A. La conservation de la matière exige qu'à chaque instant, on ait la relation.

$$\begin{pmatrix} Flux\ de \\ A\ entrant \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} débit\ de \\ production \\ de\ A \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Flux\ de \\ Aj\ sortant \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} débit \\ d'accumulation \\ de\ A \end{pmatrix}$$

## I.4.2 Réacteur parfaitement agité continu

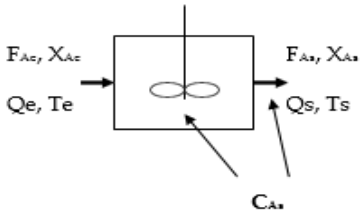
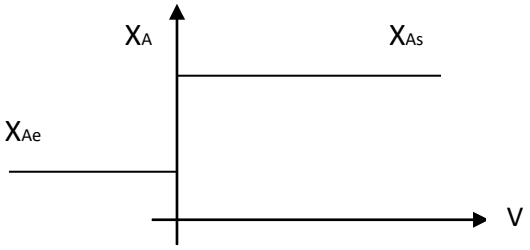



**Figure I-6 :** Réacteur parfaitement agité continu **[9]**.

La concentration est uniforme dans tout le réacteur, égale à la concentration de sortie. On n'a donc que 2 valeurs de concentrations (ou de conversion) : celle d'entrée et celle de sortie. On fera un bilan sur un constituant sur tout le réacteur **[9]**.

Le bilan contient des termes d'entrée et sortie, mais pas d'accumulation, car on travaille en régime permanent.




$$Entrée + Production = Sortie \quad (I.15)$$

$$F_{ie} + v_i\, rV = F_{is} \quad (I.16)$$

On peut écrire le bilan sur A, sur le volume total du réacteur. On détaillera ensuite en fonction des concentrations, ou en fonction de la conversion:

$$F_{Ae} + v_A\, rsV = F_{As} \quad (I.17)$$

rs : est la valeur de la vitesse en sortie de réacteur

$$QeC_{Ae} + v_A\, rsV = QsC_{As} \quad (I.18)$$

avec : $v_A = -1$

$$V = \frac{Q(C_{Ae} - C_{As})}{r_s} \quad (I.19)$$

*si* Q est le même en entrée et en sortie

$$F_{A0}(1 - X_{Ae}) - r_s V = F_{A0}(1 - X_{As}) \quad (I.20)$$

$$F_{A0}(X_{Ae} - X_{As}) = r_s V \quad \text{(I.21)}$$

$$V = \frac{F_{A0}(X_{As} - X_{Ae})}{r_s} \quad \text{(I.22)}$$

$$\tau = \frac{V}{Q_0} = \frac{C_{A_0}(X_{As} - X_{Ae})}{r_s} = \frac{C_{Ae} - C_{As}}{r_s} \quad \text{(I.23)}$$

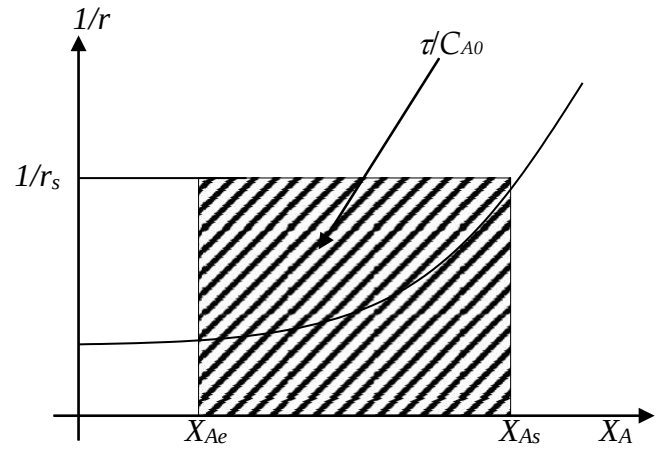



**Figure I-7** : Variation de 1/r en fonction du taux de conversion **[9]**.

$\boldsymbol{\tau}$ : est appelé le temps de passage du réacteur. Il est défini par : $\tau = V/Q_0$

C'est le temps mis pour traiter un volume de réactifs égal au volume du réacteur.

On définit un autre temps ts, le temps de séjour moyen du fluide. Ces 2 temps sont égaux si le débit est uniforme dans le réacteur.

Sur la figure, on a tracé 1/r en fonction de $X_A$, uniquement à partir de la loi cinétique. L'allure de cette courbe correspond à un ordre positif (r augmentant quand la concentration augmente). Le tracé du rectangle (égal à $t/CA_0$) traduit le bilan en RPAC **[9]**.

*Exemple : cinétique d'ordre 1* $r = kC_A$

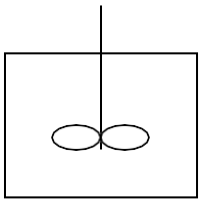
$$Q_e C_{Ae} + v_A r_s V = Q_s C_{As} \quad \text{(I.24)}$$

$$Q_e C_{Ae} - k C_{As} V = Q_s C_{As} \quad \text{(I.25)}$$

et si Q est uniforme,

$$C_{As} = \frac{C_{Ae}}{1 + k\frac{v}{Q}} = \frac{C_{Ae}}{1 + k\tau} \quad \text{(I.26)}$$

## I.4.3 Réacteur parfaitement agité fermé [9]



Le réacteur est parfaitement mélangé, en général en phase liquide. La concentration est uniforme dans le réacteur.

Bilan sur le constituant Ai sur le réacteur entier :

*Entrée* + *Production* = *Sortie* + *Accumulation* (I.27)

Les termes d'entrée et de sortie sont nuls (pas d'échange de matière avec l'extérieur). Il reste : Production = Accumulation

$$r_i V = v_i\, rV = \frac{dn_i}{dt} \tag{I.28}$$

Ecrivons la réaction : A ⟶ P

Si on s'intéresse au réactif-clé A, on peut écrire le bilan par rapport à A, et y faire intervenir la conversion $X_A$.

$$\mathrm{r_A} V = \mathrm{v_A}\, \mathrm{r}V = \frac{\mathrm{dn_A}}{\mathrm{dt}} \tag{I.29}$$

Avec : $\nu_A = -1$

$$-\mathrm{r}V = \frac{\mathrm{d}(V\mathrm{C_A})}{\mathrm{dt}} \tag{I.30}$$

Si le volume est constant, on peut le sortir de la dérivée, et on retrouve une expression connue :

$$\mathrm{r} = -\frac{\mathrm{dC_A}}{\mathrm{dt}} \tag{I.31}$$

Si on préfère travailler en conversion, on peut aussi écrire : $\mathrm{n_A} = \mathrm{n_{A_0}}(1 - \mathrm{x_A})$

$$-\mathrm{r}V = \frac{-\mathrm{n_{A0}}\, \mathrm{dx_A}}{\mathrm{dt}} \tag{I.32}$$

Par intégration, on peut calculer le temps permettant d'obtenir une certaine concentration $C_{AF}$ ou une conversion $X_{AF}$.

$$t = \int_{C_{A_0}}^{CAF} -\frac{dC_A}{r} = \frac{n_{Ao}}{v}\int_0^{x_{Af}} \frac{dX_A}{r} \qquad \text{(I.33)}$$

si V est constant

*Exemple : cinétique d'ordre 1* $r=kC_A$

$$r = kC_A = -\frac{dC_A}{dt} \; et \qquad t = \int_{C_{A_0}}^{CAF} -\frac{dC_A}{kC_A} = \frac{1}{k} Ln \frac{C_{Ao}}{C_{AF}} \; ou \qquad C_{As} = C_{Ao} \exp(-kt) \quad \text{(I.34)}$$

## I.4.4 Réacteur tubulaire à écoulement piston [9]

Ici, la concentration est uniforme sur une section de réacteur, mais varie axialement,

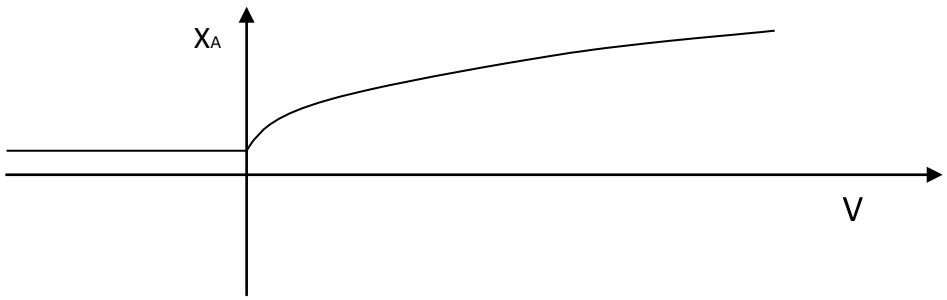



entre l'entrée et la sortie

**Figure I-8 :** Réacteur tubulaire à écoulement piston **[9].**

Dans cette tranche de faible épaisseur, on peut supposer que les concentrations sont uniformes.

Evolution axiale de la conversion :




En général, $X_A$ est nulle en entrée de réacteur.

Comme la concentration varie tout le long du réacteur, nous écrivons le bilan sur une tranche de réacteur. On s'intéresse au régime permanent.

$E + P = S$ (I.35)

$F_i + v_i\, r\, dV = F_i + dF_i$ (I.36)

$F_i$ et $F_i+dF_i$ sont les flux en entrée et sortie de tranche dV Ecrivons le bilan sur A sur la tranche $dV$ :

$F_A + v_A\, r\, dV = F_A + dF_A$ (I.37)

$- r\, dV = dF_A$ (I.38)

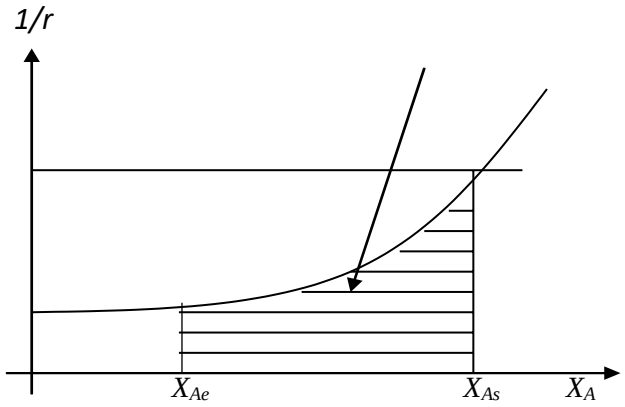
Soit : $- r\, dV = d(QC_A)$ ou $- r\, dV = -F_{A0}\, dX_A$ (I.39)

$$V = \int_{C_{Ae}}^{C_{As}} \frac{-dQC_A}{r} = F_{A_0} \int_{X_{Ae}}^{X_{As}} \frac{dX_A}{r} \quad \text{(I.40)}$$

$$\tau = \frac{v}{Q_0} = C_{A_0} \int_{X_{Ae}}^{X_{As}} \frac{dX_A}{r} \quad \text{(I.41)}$$

Même expression qu'en réacteur fermé

Pour une cinétique d'ordre positif, comme sur la figure, à conversion donnée, le temps de passage d'un RP est inférieur à celui du RAC (rectangle de hauteur 1/rs). Le RP est donc plus performant que le RAC.




*Exemple : cinétique d'ordre 1* $r=kC_A$

$- kC_A\, dV = d(QC_A)$ et si $Q$ est uniforme, on obtient l'expression suivante par division sur $Q$:

$dV/Q = -dC_A/ kC_A$ (I.42)

$$\tau = \frac{V}{Q} = \frac{1}{k} \ln \frac{C_{Ae}}{C_{As}} \qquad OU \qquad C_{As} = C_{Ae} \exp(-k\tau) \quad \text{(I.43)}$$

## I.5 Bilans énergétiques des réacteurs

Dans les opérations unitaires du génie chimique toutes les formes d'énergies mises en jeu sont généralement négligeables devant l'énergie thermique (l'énergie de compression des gaz est une exception). Par conséquent les bilans énergétiques se réduisent à des bilans thermiques. La réalisation de bilans thermiques permet d'effectuer des calculs de puissance

thermique à fournir à une installation ou à évacuer d'une installation ainsi que des déterminations de pertes thermiques **[1]**.

On applique aux bilans thermiques le principe de conservation de l'énergie entre l'entrer et la sortie pour une opération unitaire continue ou entre l'instant initial et l'instant final pour une opération unitaire discontinu. Il convient évidemment de choisir un système d'étude comme pour un problème de thermodynamique classique **[1]**.

## I.5.1 Formulation générale

$$\begin{pmatrix} Flux\ énergitique \\ entrant\ dans\ le \\ système \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} Flux\ énergitique \\ sortant\ du \\ système \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} Flux\ énergitique \\ produit\ par\ le \\ système \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} Flux\ énergitique \\ cosommé \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Flux \\ d'accumulation \\ d'énergie \end{pmatrix}$$

## I.5.2 Réacteurs parfaitement agité continu [6]

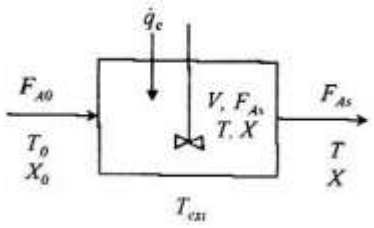



**Figure I-9 :** Réacteur parfaitement agité continu **[6].**

- **Puissance reçue de l'extérieur**

La puissance calorifique peut être nulle (réacteur adiabatique), positive ou négative, écrite alors sous la forme simple suivante :

$$\dot{q}_e = AS(T_{ext} - T) \qquad \text{(I.44)}$$

Ou $A$ est coefficient global de transfert de chaleur ($W.m^{-2}K^{-1}$), $S$ la surface d'échange (paroi du réacteur), $T_{ext}$ la température extérieure et $T$ la température dans le réacteur, qui peut varier avec le temps de séjour.

- **Puissance d'échauffement du mélange réactionnel lors de la traversée du réacteur**

Pour un réacteur opérant à pression constante, cette puissance s'écrit :

$$\dot{q}_s = F_0 M \bar{C}_{p'}(T - T_0) \tag{I.45}$$

Avec F0 le débit molaire global en entrée de réacteur, M la masse molaire moyenne du mélange, $\bar{C}_{p'}$ la capacité calorifique moyenne massique du mélange, $T_0$ et $T$, les températures d'entrée et de sortie du mélange réactionnel.

- **Puissance consommée par la réaction**

La puissance consommée par la réaction est égale au produit de la quantité de A consommée dans le réaction $F_{A0}\ X_{AS}$ par $\Delta_r H^0$ l'enthalpie de réaction :

$$\dot{q}_r = \Delta_r H^0 F_{A0} X_{AS} \tag{I.46}$$

Ou $F_{A0}$ est le débit molaire de A en entrée de réacteur, $X_{AS}$ la conversion du réactif clé A en sortie de réacteur.

- **Bilan thermique**

Dans le cas d'un échange aux parois (réacteur non adiabatique), le bilan thermique s'écrit :

$$AS(T_{ext} - T) = F_0 M \bar{C}_{p'}(T - T_0) + \Delta_r H^0 F_{A0} X_{AS} \tag{I.47}$$

Cette équation couplée à celle du débit de matière :

$$r_A(X_A, T)V = F_{AS} - F_{A0} = F_{A0} X_{AS} \quad \Rightarrow \quad r_A(X_A, T)t = C_A X_{AS} \tag{I.48}$$

## I.5.3 Réacteurs parfaitement agité fermé [6]

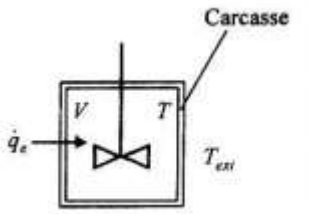



**Figure I-10 :** Réacteur fermé **[6]**.

- **Puissance reçue de l'extérieur**

Cette quantité de chaleur reçue par unité de temps peut être nulle (réacteur adiabatique), positive ou négative et s'écrite alors sous la forme simple donnée par l'équation (I.44).

- **Puissance d'échauffement du réacteur et de son contenu**

La chaleur consommée par unité de temps pour l'échauffement de la carcasse du réacteur peut s'écrire :

$$m_R C_{PR} \frac{dT}{dt_s} \tag{I.49}$$

Ou $m_R$ est la masse de la carcasse et $C_{PR}$ sa capacité calorifique massique .Excepté pour les petits réacteurs utilisés au laboratoire, cette quantité de chaleur et négligeable par rapport à la chaleur consommée pour l'échauffement du mélange réactionnel.

Si la pression dans le réacteur est constante, la puissance consommée pour l'échauffement du mélange réactionnel s'écrit :

$$\dot{q}_c = n_0 M \bar{C}_{p'} \frac{dT}{dt_s} = n_0 \bar{C}_p \frac{dT}{dt_s} \tag{I.50}$$

Ou $n_0$ est le nombre total de moles dans le réacteur au temps $t_s$, $M$ la masse molaire moyenne du mélange, $\bar{C}_{p'}\ et\ \bar{C}_p$ , respectivement les capacités calorifiques moyennes molaire et massique du mélange.

- **Puissance consommée par la réaction**

Le nombre de mole de A consommée dans le réacteur pendant le temps $dt_s$ étant égal à $r_A V = -dn_A/dt_s = n_{A0} dn_A /dt_s\ et\ \Delta_r H^0$ étant l'enthalpie de la réaction, la quantité de chaleur consommée par unité de temps s'écrit :

$$\dot{q}_r = \Delta_r H^0 \left(-\frac{dn_A}{dt_s}\right) = \Delta_r H^0\, n_{A0} \frac{dX_A}{dt_s} \tag{I.51}$$

- **Bilan thermique**

Dans le cas général d'un échange aux parois (réacteur non adiabatique), las trois termes doivent être considérés et le bilan thermique s'écrit :

$$AS(T_{ext} - T) = n_0 M \bar{C}_{p'} \frac{dT}{dt_s} + \Delta_r H^0 \, n_{A0} \frac{dX_A}{dt_s} \quad \text{(I.52)}$$

Cette équation couplée à celle du bilan de matière : $r_A(X,T)V = -\frac{dn_A}{dt_s} = n_{A0}\frac{dX_A}{dt_s}$ Permet d'obtenir $X_A$ *et* $T$ en fonction $t_s$

## I.5.4 Réacteurs en écoulement piston [6]

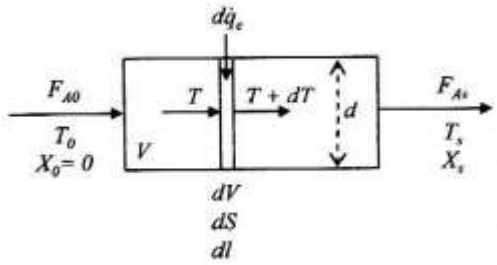



**Figure I-11 :** Réacteur en écoulement piston **[6].**

Dans ce réacteur, la température évolue avec la distance à l'entrée, rendant généralement impossible l'écriture d'un bilan global. Comme le bilan de matière, le bilan thermique est donc réalisé sur une tranche de volume $dV$ dans laquelle $T$ et $X_A$ ont des valeurs constantes (Fig.I-11)

- **Puissance reçue de l'extérieur**

La puissance calorifique reçue par l'élément $dV$ peut être nulle (réacteur adiabatique), positive ou négative, écrite alors sous la forme simple suivante :

$$d\dot{q}_e = A(T - T_{ext}).dS = A(T - T_{ext})\pi d.dl \quad \text{(I.53)}$$

- **Puissance d'échauffement du mélange réactionnel lors de la traversée de d'élément**

Pour un réacteur opérant à pression constante, cette puissance s'écrit :

$$d\dot{q}_s = F_0 M \bar{C}_{p'}.dT \quad \text{(I.54)}$$

Avec $F_0$ le débit molaire global en entrée de réacteur, $M$ la masse molaire moyenne du mélange, $\bar{C}_{p'}$ la capacité calorifique moyenne massique du mélange, $dT$ la variation de température du mélange réactionnel.

- **Puissance consommée par la réaction**

La puissance consommée par la réaction dans l'élément de volume $dV$ est égale au

produit de la quantité de A consommée $F_{A0}\,dX_A$ par $\Delta_r H^0$ l'enthalpie de réaction :

$$d\dot{q}_s = \Delta_r H^0\, F_{A0}\, dX_A \tag{I.55}$$

Ou $F_{A0}$ est le débit molaire de A en entrée de réacteur.

- **Bilan thermique local**

Dans le cas général d'un échange aux parois (réacteur non adiabatique), le bilan thermique de l'élément de volume *dV s'écrit* :

$$A(T - T_{ext})\pi d.dl = F_0 M \bar{C}_{p'}.dT + \Delta_r H^0\, F_{A0}\, dX_A \tag{I.56}$$

Cette équation couplée à celle du bilan de matière :

$$r_A dV = r_A\left(\pi d^2.\frac{dl}{4}\right) = F_{A0}\, dX_A \tag{I.57}$$

Permet d'obtenir $X_A$ et *T* en fonction de la distance *l* à l'entrée du réacteur.

## I.6 Conclusion

Ce chapitre constitue une étude bibliographique assez générale sur les réacteurs chimiques. Différents types des réacteurs chimiques ainsi que leurs critères de classification ont été présentés. En effet, ces critères permettent de définir un certain nombre de catégories de réacteurs idéaux utilisés pour représenter le comportement des réacteurs réels.

Ensuite nous avons utilisé la méthode de génie chimique qui est basé sur la formulation des équations de bilans matières, et des bilans énergétiques dans le but d'effectuer des calculs de puissance thermique à fournir à une installation où à évacuer d'une installation.

Après avoir passé en revue les différents types des réacteurs chimiques dans ce chapitre, le chapitre suivant sera consacré au simulateur de processus en génie chimique, ainsi on présentera la simulation des deux logiciels Aspen Plus et Aspen Hysys.

# CHAPITRE II

# SIMULATEURS DE PROCESSUS EN GÉNIE CHIMIQUE

## II.1 Introduction

Les processus industriels impliquent rarement une seule unité de processus débit pour les processus et sur tout le matériel de toutes les unités individuelles requiert simulant l'usine de l'ensemble. Une usine chimique est un processus industriel usine qui fabrique des produits chimiques en général sur une grande échelle La générale objectif d'une usine chimique est à créer de nouveaux matériaux Les logiciels de simulation ordinateur sont l'installation industrielle utilisés sur les industries de l'énergie chimique, des huiles, des gaz et des électricité **[10].**

Simulation logiciel est utilisé largement pour concevoir équipement pour que le produit final comme fermer pour concevoir des spécifications sans possible sans des autres dépenses en cours modification Simulation Logiciel donne utile formation expérience sans un résultat catastrophique La simulation des processus est utilisée conception, développement, analyse, et optimisation des processus techniques et est principalement appliquée aux plantes et procédés chimiques La simulation des processus est une présentation modèle de la production chimique, physique, d'autres processus techniques et des opérations de l'unité dans les logiciels Les fondamentaux sont une précise des propriétés chimiques et physiques des pur composants et mélanges, des réactions, et des modèles qui en combinaison permettent le calcul de un processus en computers sont posées et connectées par des produits ou des transmissions Le logiciel a pour souder le masse et point de fonctionnement **[10].**

Dans ce chapitre, les reconnaissances du précédent chapitre ensemble est employé pour simuler un processus.

## II.2 Approche de simulation

La simulation étudie le comportement d'un système. Elle permet, en particulier, d'étudier l'évolution du système en faisant varier un ou plusieurs facteurs et en confrontant les valeurs calculées aux valeurs observées **[11].**

### II.2.1 Types de simulation

On peut distinguer principalement deux types de simulation dans le cas des procédés chimiques ; la simulation statique (steady state) et la simulation dynamique (transient state).

#### II.2.1.1 Simulation statique

La simulation statique d'un procédé vise à définir les propriétés des flux (débit, température, fraction vaporisée, ...), ainsi que les bilans matière et d'énergie en régime

stabilisé. Le procédé est décomposé en blocs représentant les différentes opérations unitaires mises en œuvre. Les blocs sont liés entre eux par des flux de matière ou d'énergie **[11]**.

### II.2.1.2 Simulation dynamique

La simulation dynamique d'un procédé vise à définir les propriétés des courants en fonction du temps, pendant des situations transitoires où le régime n'est pas stable **[11].**

Il est utile pour concevoir la structure de contrôle du processus, étudier les performances des contrôleurs en soumettant le système à diverses perturbations et optimiser les paramètres de contrôle en vue de développer un processus économique**[12]**.

## II.3 Méthodes de simulation des procédés

### II.3.1 Simulation modulaire séquentielle

La simulation du fonctionnement en régime permanent d'une usine chimique peut être représentée par un système d'équations algébriques non linéaires :

$$F(x)=0 \qquad \text{(II.1)}$$

ou f est un vecteur de fonctions et x est le vecteur de variables décrivant les flux d'entrée et de sortie d'une unité particulière et les paramètres de conception de cette unité (par exemple, le volume du réacteur, le taux de reflux pour la colonne de distillation ou la zone de l'échangeur de chaleur). Ce vecteur de fonctions f est dérivé des lois de conservation de la masse, de l'impulsion et de l'énergie, des lois cinétiques des systèmes de réactions et de l'équilibre chimique et de phase. Le système d'équations (II.1) a un fort caractère non linéaire, notamment en raison de la relation entre les propriétés physiques et les variables d'état. Il est remarquable que l'estimation des propriétés physiques puisse consommer jusqu'à 90% du temps de calcul.

En mode simulation, le système d'équations (II.1) peut contenir plusieurs milliers d'équations et de variables. Comme il peut être très difficile de résoudre un modèle unique qui inclut toute l'usine, la procédure de solution nécessite une approche systématique et modulaire. La stratégie adoptée par le simulateur de processus modulaire séquentiel consiste à écrire des équations d'équilibre séparément pour chaque unité. Cela conduit à réécrire le système d'équations (II.1) sous la forme suivante :

$$Fi\,(x)= 0,\ i=1,2,\ldots n_u \qquad \text{(II.2)}$$

Ou $f_i$ est un sous-ensemble du vecteur f avec les fonctions associées à l'unité i, $n_u$ est le

nombre d'unités dans la plante.

Pour résoudre l'équation (II.2), l'approche modulaire séquentielle est de loin la plus largement utilisée dans les simulateurs de processus. La stratégie modulaire repose sur les hypothèses suivantes :

1. Les variables de conception des unités doivent toujours être définies, c'est-à-dire qu'elles ne sont pas inconnues. La même hypothèse est faite pour les variables associées aux flux entrant dans l'usine par l'extérieur (flux d'alimentation).

2. Le flux d'informations dans le modèle mathématique coïncide avec le flux de matières dans le processus (le simulateur de processus Aspen Hysys est une exception remarquable). Cette hypothèse nous permet de rassembler les variables associées aux flux entrant dans l'unité et de définir les fonctions qui calculent les variables pour les flux de sortie.

Ces deux hypothèses conduisent à réécrire les équations (II.2) comme suit :

$$X^{out} = g\{x^{in}\},\ i=1, 2\ldots n_u \qquad \text{(II.3)}$$

Ou $x_i^{out}$ et $x_i^{in}$ sont des sous-ensembles des variables associées à la sortie et aux flux d'entrée de l'unité i, respectivement. Le flux de sortie pour une unité i devient le flux d'entrée pour une unité en aval et le calcul se poursuit comme précédemment jusqu'à ce que toutes les unités soient visitées. Ainsi, un schéma complet sans flux de recyclage permet de calculer en utilisant séquentiellement l'équation (II.3) (c'est-à-dire qu'une seule itération de schéma est nécessaire pour atteindre une solution convergente). Néanmoins, l'existence de flux de recyclage empêche un calcul séquentiel du schéma de principe, puis une stratégie itérative doit être adoptée. La méthodologie de la solution pour les schémas de flux contenant des flux de recyclage est plus compliquée et comprend une analyse topologique pour déterminer la séquence de calcul et les flux de déchirures correspondants. Cette stratégie nécessite également des calculs itératifs pour toutes les unités de la boucle de recyclage, car la valeur calculée pour le recyclage peut différer de l'estimation initiale. De plus, les techniques de gestion des recyclages dans un simulateur modulaire séquentiel doivent définir un critère de convergence et une méthode pour mettre à jour les valeurs estimées des flux de déchirures pour chaque itération. Les techniques de convergence de boucle de recyclage les plus courantes sont la substitution directe, les techniques de Wegstein, Broyden et Newton-Raphson. Ceux-ci sont discutés plus tard. Les simulateurs de processus commerciaux sont capables d'identifier les boucles de recyclage et sélectionner automatiquement les flux à déchirer et la méthode de convergence. De nombreux packages de simulation permettent

également à l'utilisateur de sélectionner la déchirure des flux et la méthode de convergence **[13]**.

### II.3.1.1 Avantages et inconvénients de l'approche modulaire séquentielle

Avantages :

- L'architecture de schéma est plus facile à comprendre car elle suit de près le diagramme de processus.
- Les blocs d'unités peuvent être facilement ajoutés ou supprimés de la feuille de calcul.
- Les modèles des différentes unités peuvent être préparés et testés séparément (en tant que sous-programme informatique) conduisant à une bibliothèque de modules d'unité.
- Des méthodes de solution spécifiques, y compris l'initialisation, sont développées pour chaque unité de processus.
- En raison d'exigences rigides, les données saisies par l'utilisateur peuvent être vérifiées assez facilement pour être complètes et cohérentes.
- Contrôle facile de la convergence, à la fois au niveau de l'unité et du schéma**[14]**.

Inconvénient :

- Ils sont particulièrement adaptés à la simulation de processus et non à la simulation dynamique, l'optimisation ou la conception, car une procédure itérative est nécessaire pour répondre aux contraintes, augmentant ainsi le temps CPU.
- Difficultés actuelles avec les schémas de flux impliquant un certain nombre de recyclages**[14]**.

## II.3.2 Simulation simultanés ou d'équations orientées

$$\frac{dx}{dt} = f(u, x, d, p) \qquad \text{(II.4)}$$

La solution à l'état stable est obtenue en définissant les dérivés à zéro. Le système de DAE globale (II.4) est clairsemé et rigide, sa taille varie entre 103 et 105 équations.

La simulation dynamique est plus exigeante que son homologue à l'état stable. Tout d'abord, elle a besoin de beaucoup plus des éléments de calibrage. Ensuite, la variation de pression ne peut pas être négligée ou localisée dans la spécification de l'unité de simulation. Cependant, en général, la spécification des variables est plus flexible. Toute variable du schéma de traitement pourrait être paramétrée ainsi, indépendamment de ce qui concerne les

flux d'entrée ou de sortie, ou les variables d'unité internes.

L'architecture logicielle construit avec une approche de l'EO est présenté dans la figure (II.4). L'entrée du problème de la simulation peut être formulée au moyen d'un métalangage, ou être supporté par une interface intelligente. Dans Aspen Dynamics, la définition du problème commence à l'état d'équilibre à Aspen Plus dans un environnement SM. Ajouter des termes de capitalisation pour les équations d'unités génère le système DAE. Dans un simulateur de traitement algorithmique EO le comprend non seulement la solution mathématique, mais aussi problème de débogage, la compilation / liaison, ainsi que la correction et l'addition d'équations.

Une caractéristique importante est le post traitement des résultats, que des enregistrements de temps et des parcelles de différentes variables **[15]**.

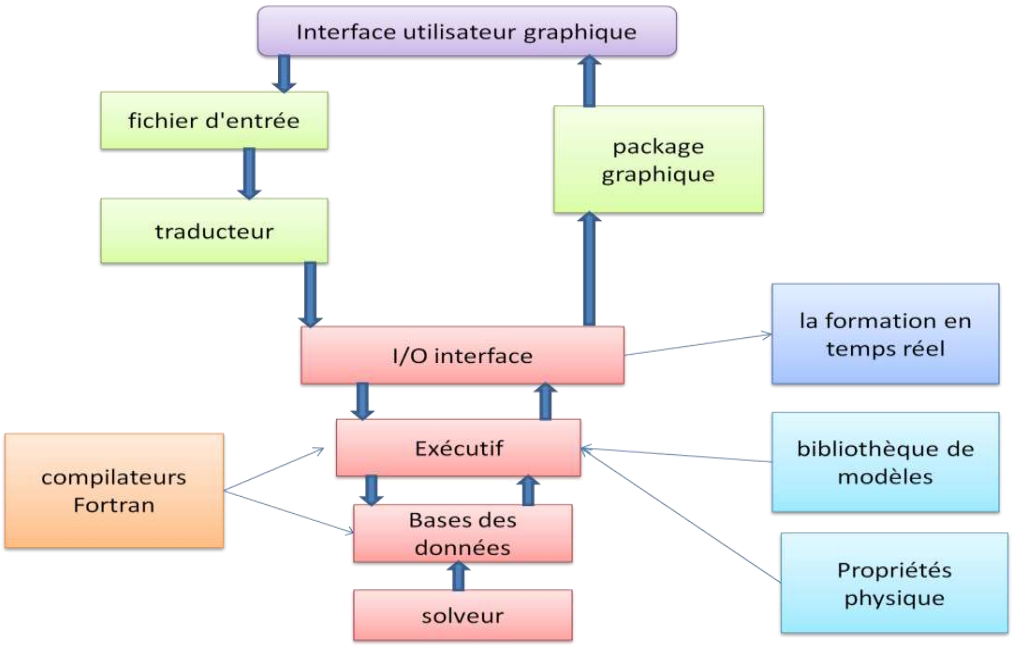



**Figure II-1** : Architecture logicielle de simulation d'une équation-Orientée **[13].**

Dans notre projet nous utilisons Aspen plus et Aspen Hysys pour réaliser notre simulation dans un CSTR réacteur.

## II.4 Simulateurs de processus chimiques

Sont les outils de base des techniciens et des ingénieurs de procédés, car ils permettent d'établir aisément et avec rigueur les bilans de matière et d'énergie sur les procédés **[16]**.

Le marché de la simulation de processus actuel a subi de profondes transformations au cours de la décennie 1985-1995. Relativement peu de systèmes ont survécu; ce sont CHEMCAD, Aspen Plus, Aspen HYSYS, PRO / II, ProSiM Plus, Super Pro Designer et gPROMS **[14].**

### II.4.1 Structure d'un simulateur de procédés

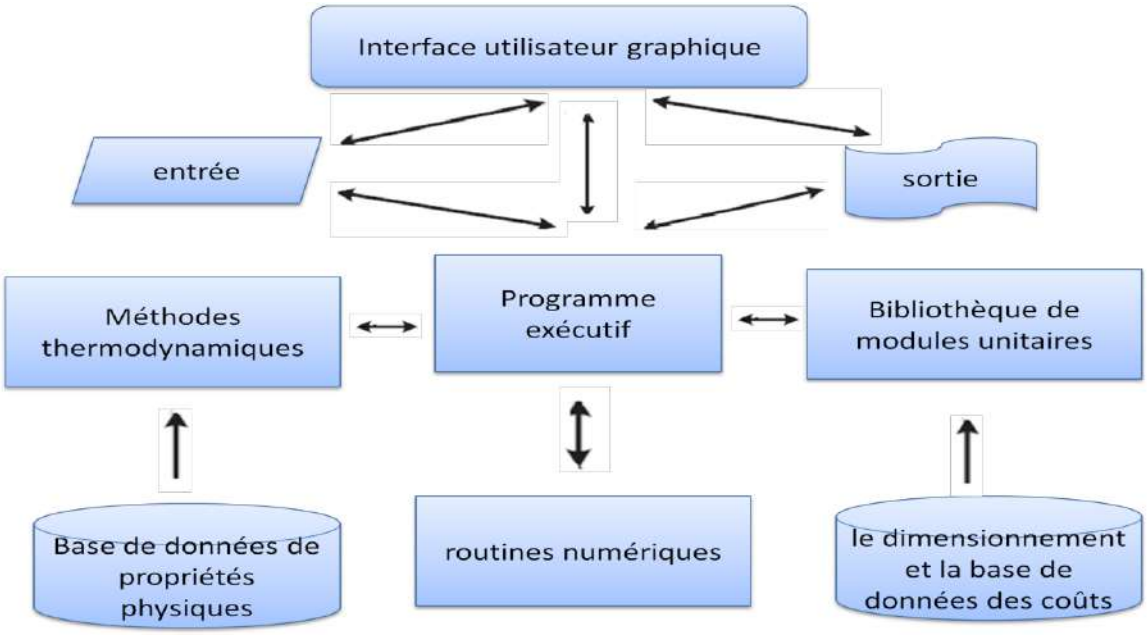



**Figure II-2** : Architecture des simulateurs de procédés **[14].**

La figure II.2 montre les interconnexions entre les composants de base d'un logiciel de simulation, qui sont décrits de façon concise ici:

1. Banque de données des composants: Une base de données avec les paramètres nécessaires pour calculer les propriétés physiques nécessaires.
2. Méthodes thermodynamiques de prédiction de la propriété: un ensemble de méthodes thermodynamiques pour estimer les données physiques et les propriétés thermodynamiques.
3. Flowsheet constructeur (interface utilisateur graphique): fournit à l'utilisateur une interface pour générer le schéma du flowsheet de l'installation à simuler dans un environnement graphique composant de logiciels de simulation de processus.
4. Bibliothèque de l'unité de modules: Les sous-programmes pour effectuer des bilans énergétiques et matériels et des calculs de conception pour le processus typique des unités d'ingénierie.

5. Routines numériques: Une collection de méthodes mathématiques pour résoudre les systèmes de linéaires, des équations non linéaires et différentielles.
6. Générateur de sortie des données: Rapport des résultats de la simulation par des tables et des affichages graphiques.
7. Programme exécutif (schéma solveur): Le cœur de tout simulateur de processus et contrôle la séquence des calculs et de la convergence globale de la simulation**[14].**

## II.4.2 Types de simulateurs de processus

**Tableau II-1 :** Aspen Plus et Aspen Hysys vs autres logiciels concurrents**[17].**

| **Nos notes, selon le cas pour un cours de premier cycle** | **Aspen Plus** | **Aspen Hysys** | **Pro/II** | **Pro Max** | **GProms** | **COCO** |
|---|---|---|---|---|---|---|
| Coût des licences académiques | Gratuit | Gratuit | Gratuit | Gratuit | Faible | Gratuit |
| Installation sur les ordinateurs des étudiants | NON | NON | NON | ? | ? | OUI |
| Vaste base de données sur les propriétés et les produits chimiques | Meilleur | Meilleur | Bien | D'accord | D'accord | Pauvres |
| Modèles de fonctionnement d'unité étendus | Meilleur | Meilleur | Bien | D'accord | Bien | Pauvres |
| Commercialement pertinent | OUI | OUI | OUI | OUI | OUI | Limité |
| Facilité d'utilisation, facilité d'enseignement | Pas facile | Pas facile | Plus facile | Plus facile | Difficile | D'accord |
| Connectivité avec Microsoft Excel | OUI | OUI | OUI | OUI | OUI | OUI |
| Estimation du coût en capital | OUI | OUI | NON | NON | NON | NON |
| Optimisation du réseau d'échangeurs de chaleur | OUI | OUI | NON | NON | NON | NON |
| Extensible à la simulation dynamique | Bien | Meilleur | Bien | NON | Meilleur | NON |
| Part de marché / Popularité | Plus | Bien | Bien | Certains | Bien | Peu |

### II.4.3 Objectifs des simulateurs

Les objectifs majeurs des simulateurs de procédés sont les suivants :

- ✓ Résoudre les équations des bilans de matière et d'énergie pour l'ensemble des appareils du procédé.
- ✓ Calculer les caractéristiques (débit, composition, température, pression, propriétés physiques) pour tous les fluides qui circulent entre les appareils.
- ✓ Fournir les éléments nécessaires au dimensionnement des équipements, tels que les quantités de chaleur échangées ou les débits internes d'une colonne.

À ces objectifs, s'ajoutent :

- ❖ L'estimation des coûts d'investissement et de fonctionnement, dans un contexte de développement durable, de l'impact sur l'environnement et la sécurité.
- ❖ L'optimisation des conditions de fonctionnement du procédé **[18]**.

## II.5 Présentation d'Aspen PLUS et d'Aspen HYSYS

### II.5.1 Aspen PLUS

#### II.5.1.1 Définition

Il s'agit d'un instrument de démonstration de processus pour la simulation, la conception, la performance, l'optimisation et la planification en régime permanent pour les industries chimiques, chimiques spécialisées, pétrochimiques et métallurgiques **[2].**

#### II.5.1.2 Les principales caractéristiques d'Aspen Plus [21]

##### II.5.1.2.1 Opérations unitaires et les courants

Aspen plus est construit autour d'une architecture séquentielle-modulaire. Une opération unitaire est représentée par un sous-programme auquel on fournit les variables des débits d'entrée et les paramètres de fonctionnement, et qui renvoie les variables des débits de sortie.

Un débit est représenté par un vecteur contenant :

- ❖ Les débits partiels de chaque constituant
- ❖ La pression, la température

- ❖ L'enthalpie massique, la fraction de vapeur, celle de liquide l'entropie massique, et la densité

Il est possible de décomposer un débit en sous-débits, ayant chacun cette structure générale.

Les sous-débits peuvent être du type MIXED (mélange de liquide, vapeur et solide), CISOLID (solide conventionnel inerte vis à vis des équilibres entre phases) ou NC (solide non- conventionnel, c'est à dire auquel on ne peut pas attribuer de formule chimique précise.

### II.5.1.2.2 Calcul de recyclage

Dans une approche séquentielle-modulaire, les recyclages sont convergés itérativement : on définit un courant "coupé", et on établit un processus de convergence sur les variables de ce courant coupé, en calculant de façon itérative les opérations de la boucle de recyclage.

A partir d'une description de la structure du procédé (schéma de connexion des opérations unitaires) le logiciel détermine automatiquement les boucles de recyclage, choisit les courants à couper pour permettre la convergence, et détermine la séquence de calcul des opérations unitaires.

Il est néanmoins possible pour l'utilisateur de choisir d'autres courants coupés que ceux proposés par le logiciel, ce qui est très utile lorsque l'on sait en initialiser les valeurs.

### II.5.1.2.3 Le système de propriétés physiques

Les propriétés physiques (thermodynamiques et propriétés de transport) sont nécessaires au cours d'une simulation pour le calcul des opérations unitaires (équilibres liquide-vapeur et enthalpies), et pour le dimensionnement (viscosité, conductivité thermique...).

Un système de calcul de ces propriétés physiques donne ces propriétés comme fonctions des variables d'état (température, pression, composition), à partir de modèles d'origine empirique ou moléculaire, en utilisant des paramètres stockés dans des banques de données (coordonnées critiques, paramètres de corrélation (Antoine)). ASPEN fournit un grand nombre de "méthodes" de calculs pour ces propriétés physiques, les collections de routines de calcul des propriétés physiques qui sont directement utilisées par les modèles d'opérations unitaires.

Le choix raisonné des modèles et corrélations adaptées au calcul des propriétés thermodynamiques et de transport pour un type de mélange donné est souvent un domaine de spécialiste.

## II.5.2 Aspen HYSYS

### II.5.2.1 Définition

Aspen Hysys est un environnement de simulation de processus conçu pour desservir de nombreuses industries de transformation. Il s'agit d'un programme interactif, intuitif, ouvert et extensible. Il a également de nombreuses options supplémentaires pour étendre ses capacités à des industries spécifiques. Ce programme permet de créer des modèles rigoureux en régime permanent et dynamiques pour la conception des usines. En dehors de cela, la surveillance, le dépannage, l'amélioration opérationnelle, la planification d'entreprise et la gestion des actifs peuvent être effectués avec le simulateur HYSYS. Grâce à l'interface HYSYS entièrement interactive, les variables de processus et la topologie de fonctionnement de l'unité peuvent être facilement manipulées **[20].**

### II.5.2.2 Gestionnaire de base de simulation

Aspen Hysys a utilisé le concept de l'ensemble de fluides pour contenir toutes les informations nécessaires pour effectuer des calculs de propriétés physiques et flash. Cette approche vous permet de définir toutes les informations (package de propriétés, composants, composants hypothétiques, paramètres d'interaction, réactions, données tabulaires, etc.) à l'intérieur d'une seule entité.

- Cette approche présente quatre avantages clés:

• Toutes les informations associées sont définies dans un seul emplacement, ce qui permet de créer et de modifier facilement les informations.

• Les packages de fluides peuvent être stockés sous forme d'entités complètement définies pour une utilisation dans n'importe quelle simulation.

• Les listes de composants peuvent être stockées séparément des packages de fluides en tant qu'entités complètement définies pour une utilisation dans n'importe quelle simulation.

•Plusieurs ensembles de fluides peuvent être utilisés dans la même simulation. Cependant, ils sont définis dans le gestionnaire de base commun.

Le gestionnaire de base de simulation est une vue des propriétés qui vous permet de créer et de manipuler plusieurs packages de fluides ou listes de composants dans la simulation **[21].**

## II.6 Conclusion

Les simulateurs permettent d'établir de manière efficace et rigoureuse les bilans de matière et de l'énergie sur les procédés, déchargeant ainsi l'ingénieur de calculs fastidieux et répétitifs. On comprend alors aisément pourquoi ils constituent les outils de base pour la conception des procédés **[18].**

Après avoir passé en revue les différents types de simulateurs de processus, on présentera la simulation d'un CSTR en régime stationnaire des deux logiciels Aspen plus et Aspen Hysys dans leschapitres suivants.

# CHAPITRE III
# SIMULATION D'UN CSTR EN RÉGIME STATIONNAIRE

## III.1 Choix des modèles

Le simulateur RCSTR a été utilisé dans ce travail.

## III.2 Méthode appropriée

Le modèle thermodynamique CHAO-SEADER a été utilisé comme une méthode appropriée.

## III.3 Choix de production

## III.3.1 Éthylbenzène

L'éthylbenzène est un liquide incolore avec une odeur sirupeuse d'essence. C'est une petite molécule aromatique hydrocarbure. L'éthylbenzène est fabriqué par une alkylation du benzène. L'alkylation peut se produire en phase vapeur ou liquide et les deux alkylations utilisent une zéolite ou un aluminium catalyseur au chlorure.

**Utilisations de l'éthylbenzène :**

- **Plus soluble** : dans les encres, les ciments élastiques, les vernis et les peintures.
- **En tant qu'agent anti-cognement** : l'éthylbenzène est considérer comme une complémentaire au gaz en tant que spécialiste du contre-coup, il réduit le bruit du moteur et l'accélération de l'indice d'octane.
- **Comme récupération de gaz ordinaire** : l'éthylbenzène peut être infusé dans le sol.
- **Éthylbenzène** : assume une part critique dans le secteur pétrochimique comme la majeure partie de la création de styrène, précurseur du polystyrène, matière plastique typique. En 2012, plus de 99% de l'éthylbenzène créé a été dévoré dans la génération de styrène.

L'éthylbenzène est la plupart du temps présent dans d'autres articles fabriqués, y compris les pesticides, la cellulose dérivation d'acide acétique et élastique fabriqué **[2]**.

## III.4 Cinétique chimique

La chimie spécifique utilisée pour comprendre le comportement à l'état stationnaire du CSTR et démontrer l'utilisation d'Aspen Plus et hysys est la réaction de l'éthylène (E) avec le benzène (B) pour former l'éthylbenzène (EB). Il y a une réaction répétée qui produit un diéthylbenzène produit indésirable (DEB). Une troisième association de réaction, le benzène et le diéthylbenzène pour former éthylbenzène **[2].**

$$E + B \rightarrow EB \quad \text{(III.1)}$$

$$E + EB \rightarrow DEB \quad \text{(III.2)}$$

$$DEB + B \rightarrow 2EB \quad \text{(III.3)}$$

Les réactions chimiques suivant en phase liquide sont supposées comme des réactions irréversibles. Les taux de réaction des trois réactions sont supposés être celles données ici :

$$R_1 = (C_E)\,(C_B)\,(1.528\times10^6)\,e^{(-71130000)/RT} \quad \text{(III.4)}$$

$$R_2 = (C_E)\,(C_{EB})\,(2.778\times10^3)e^{(-83680000)/RT} \quad \text{(III.5)}$$

$$R_3 = (C_{DEB})\,(C_B)\,(0.4167)e^{(-62760000)/RT} \quad \text{(III.6)}$$

Les unités de R sont kmol $s^{-1}$ $m^{-3}$. Les concentrations ont des unités de kmol / $m^3$. Les énergies d'activation ont unités de J/kmol. La température est en Kelvin **[2]**.

$C_E$ est la concentration d'éthylène; $C_B$ est la concentration de benzène.

$C_{EB}$ est la concentration d'éthylbenzène; $C_{DEB}$ est la concentration de di-éthylbenzène.

En analysant soigneusement les réactions chimiques ci-dessus et la cinétique de vitesse, nous conclusion directement le débit d'alimentation, la température et le volume du réacteur.

## A. Effet du débit d'alimentation

Le débit d'alimentation en benzène doit être supérieur au débit d'alimentation en éthylène pour la formation du moindre de produit indésirable, c'est-à-dire de di-éthylbenzène. Augmenter le débit d'alimentation du benzène a également des impacts négatifs tels que l'augmentation du coût de séparation qui s'ajoute au coût de production, c'est-à-dire la minimisation de la marge bénéficiaire.

La solution du problème citée ci-dessus consiste à optimiser le débit d'alimentation en utilisant Aspen (plus et hysys) par la fixation de l'un du débit d'alimentation et en faisant varier l'autre.

## B. Effet de la température du réacteur

En comparant les enthalpies de la réaction ci-dessus, l'enthalpie du produit indésirable est supérieure à l'enthalpie du produit souhaité ce qui signifie que l'augmentation de la température du réacteur favorise la formation d'un produit indésirable plus que le produit

souhaité. Il est donc nécessaire de maintenir la température optimale du réacteur afin de maximiser les performances.

## C. Effet du volume du réacteur

Le réacteur fournit un temps de séjour suffisant aux réactifs, où les réactifs sont convertis en des produits. En cas de réaction exothermique, la réduction de la chaleur est nécessaire dans ce cas, le réacteur fournit une zone de réacteur suffisante pour le refroidissement. L'augmentation du volume du réacteur permet un meilleur refroidissement mais agréger le temps de résidence et le coût en capital. La diminution du volume du réacteur peut entraîner deviennent incontrôlables et conduisent à la formation de produits indésirables.

## III.5 Aspen Plus simulation de CSTRS

### III.5.1 Configuration de la simulation

Nous cliquons sur démarrer et sélectionnons le programmes, Aspen Tech, Aspen Plus V 11. La figure III.1 illustre l`interface du programme Aspen.A *Blank Simulation* vierge est sélectionnée et un clic sur *create* permis l`ouverture d`une feuille de calcul vierge illustrée à la figure III.2.

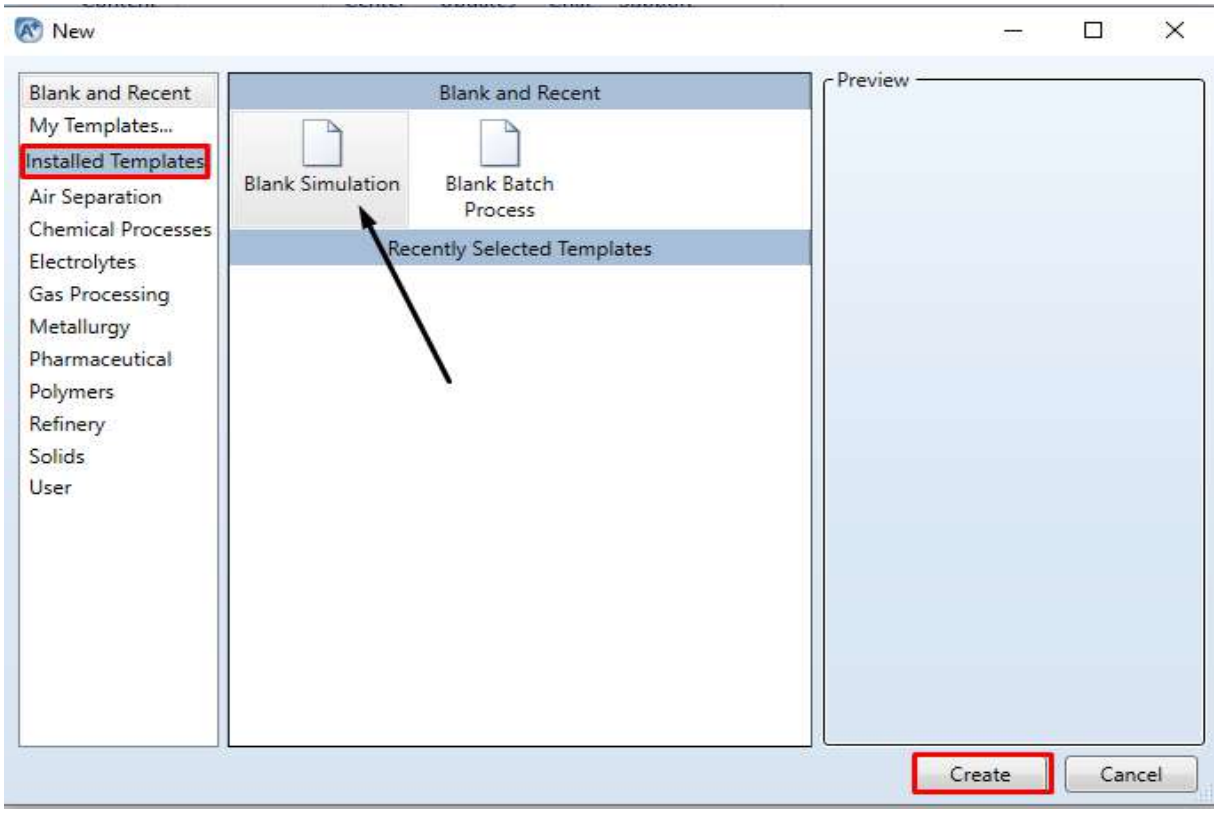



**Figure III-1**: Simulation Open Aspen Plus.

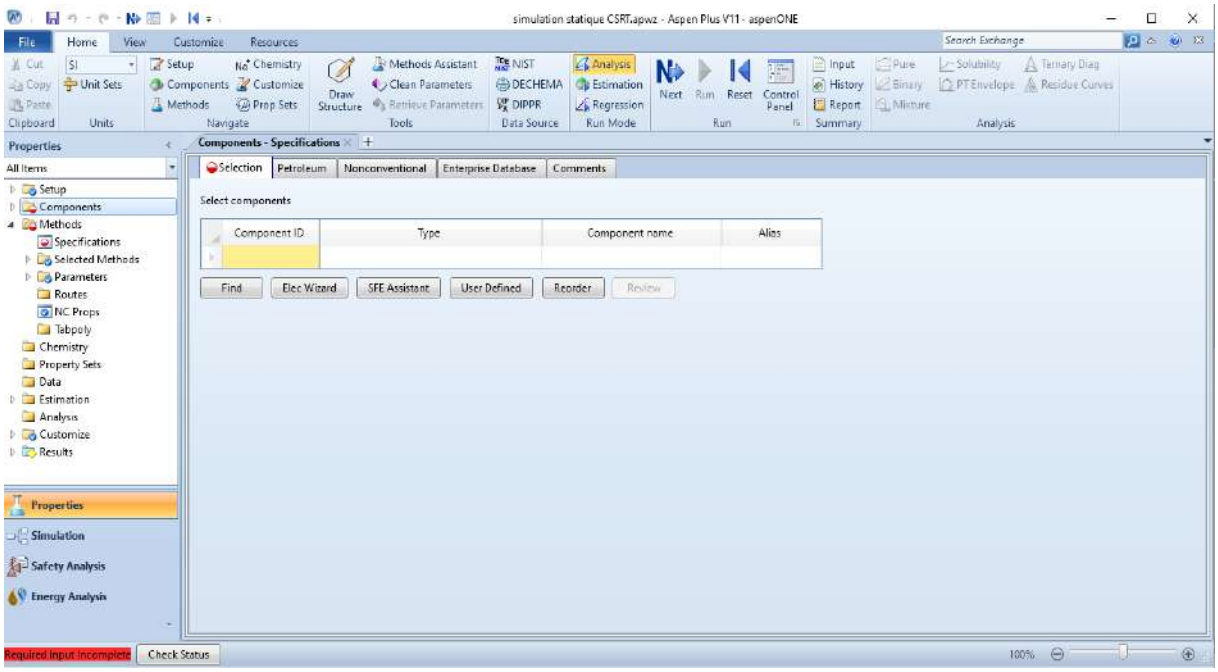



**Figure III-2** : Fenêtre Aspen Plus avec feuille de flux.

À l'aide d'Aspen Plus, sélectionnez le formulaire : simulez "Chemicals with Metric Units", nous modifions les unités en «SI ». Comme le montre sur la figure III.3.

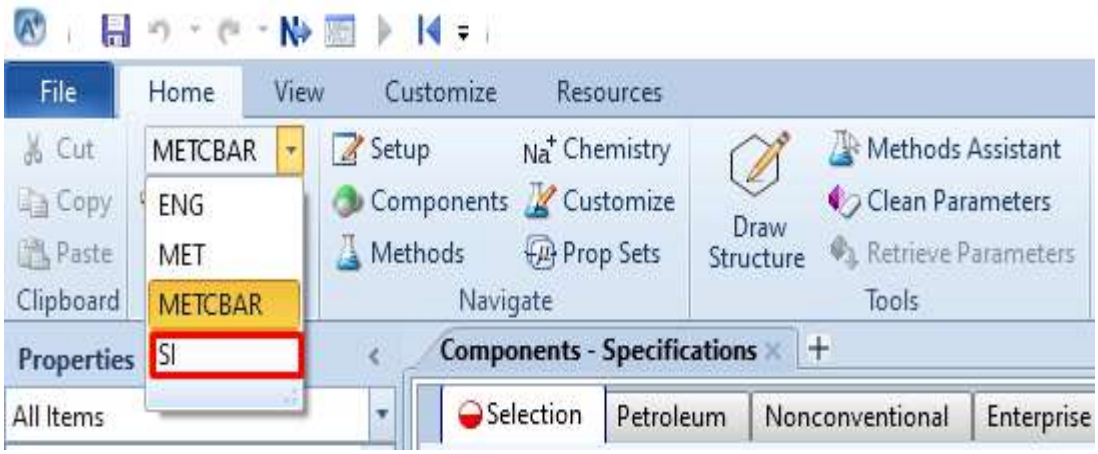



**Figure III-3** : Spécification des unités.

Les composants chimiques qui seront utilisés dans la simulation sont déterminés en cliquant sur *Components*, *Specifications*, et *Find.* La fenêtre illustrée à la figure III.4 s'ouvre. Nous écrivons le nom du composant ou de la formule et cliquons sur *" Find now* ". Par exemple, si vous avez écrit « éthylène », la boîte sous la figure III.4 s'ouvre. Cliquez sur "ETHYLENE" et cliquez sur *Add.* Répétez la procédure pour "ETHYLBENZENE" et "BENZENE". M-DEB a été choisi sur trois isomères DEB possibles (ortho, méta et para), choisis pour représenter le DEB, et s'est avéré être l'isomère DEB le plus persistant.

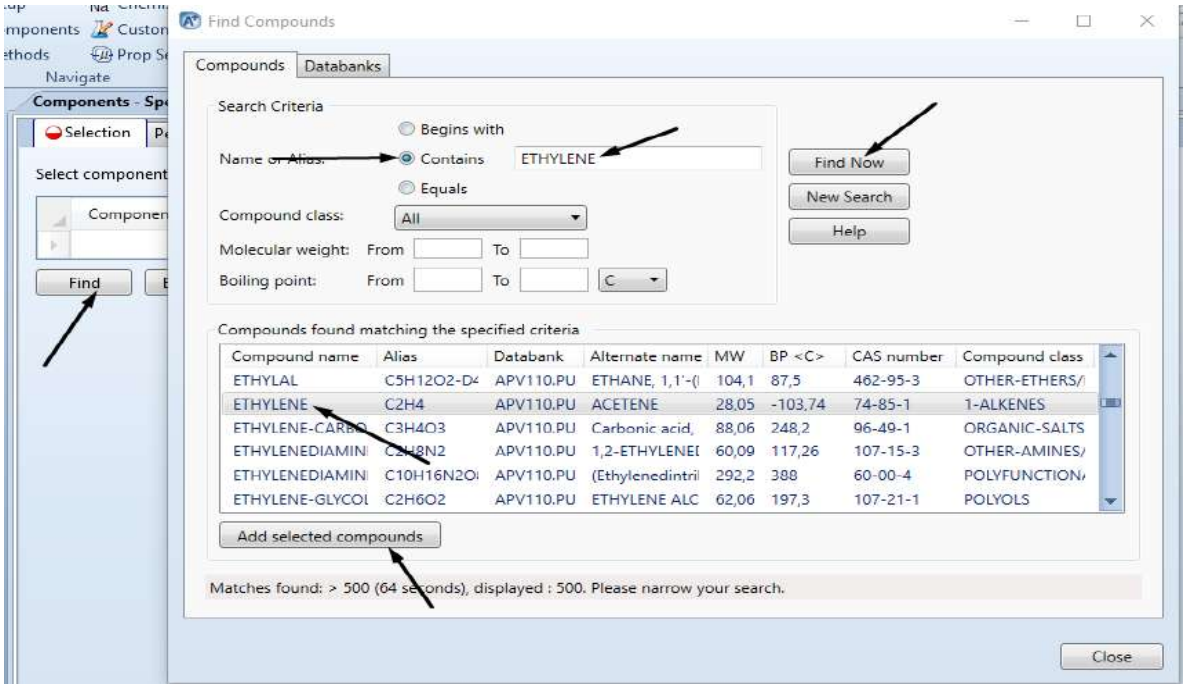



**Figure III-4** : Sélection du composant éthylène.

Les noms des composants dans *Component ID* de composants peuvent être modifiés en quelque chose plus pratique en surlignant, La liste des composants renommés apparaît de la figure III.5.

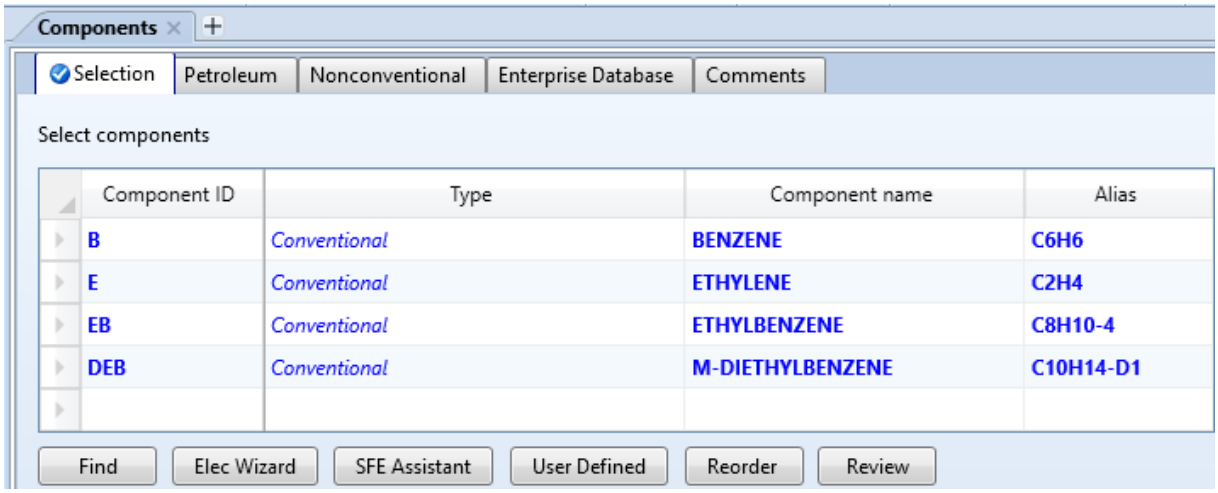



**Figure III-5** : Le benzène (B), l'éthylène (E) et l'éthylbenzène (EB), le méta-diéthylbenzène (DEB) sont ajoutés comme composants.

Le package de propriétés physiques à utiliser doit être spécifié. *Chao–Seader* concéder comme le meilleur fonctionne pour ce type de système d'hydrocarbures. Cliquez sur *Methods*

et *Specifications*. Utilisation la flèche déroulante dans *Base method* pour sélectionner « CHAO-SEA » comme indiqué sur la Figure III.6 et III.7.

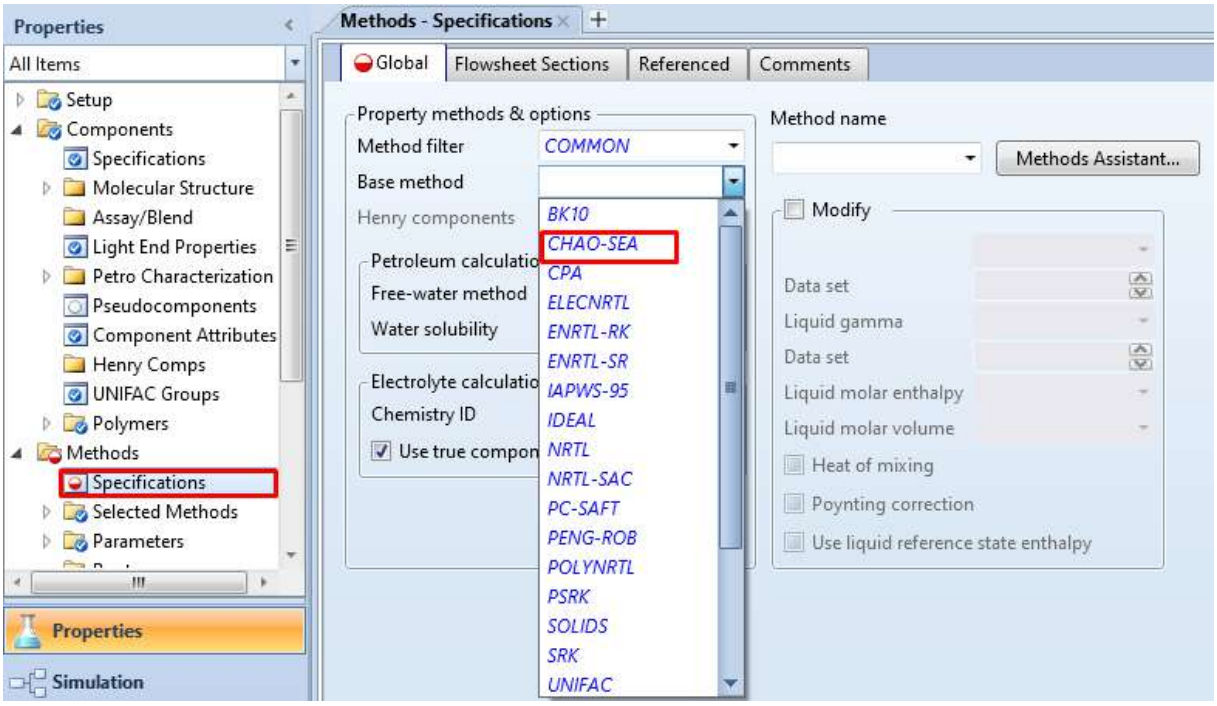



**Figure III-6** : Méthode de sélection des propriétés physiques.

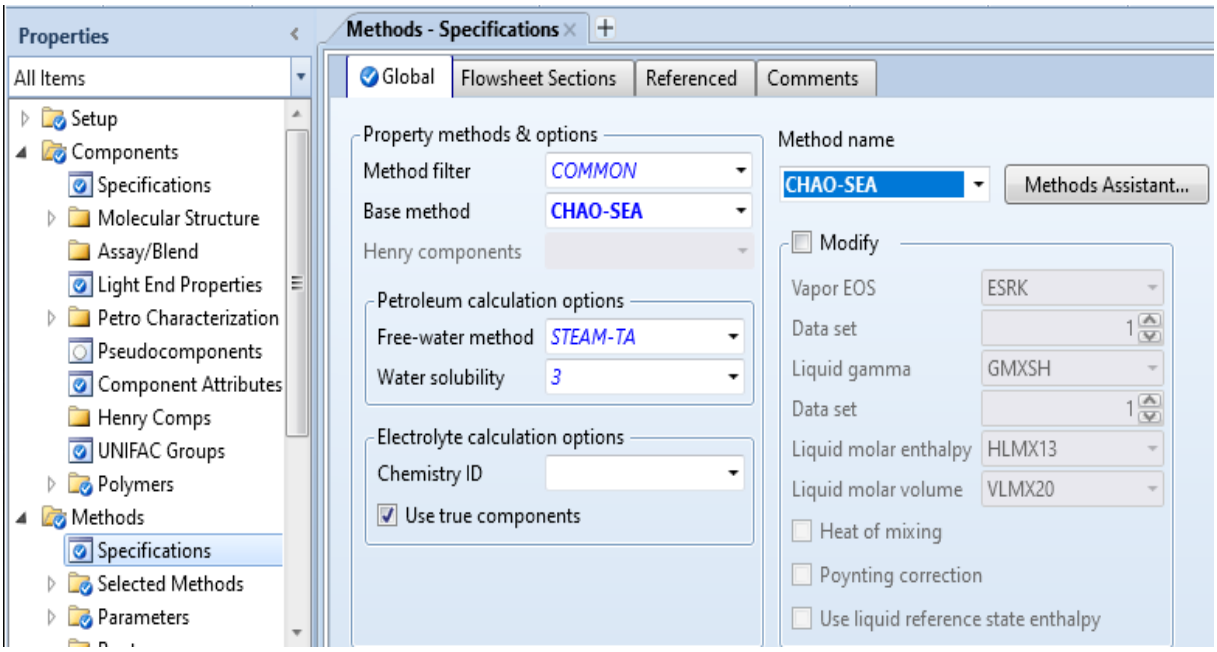



**Figure III-7 :** Méthode Chao-Seader choisie.

Au bas de la fenêtre se trouvent des onglets de page pour différentes unités et opérations. Vous cliquez sur l'onglet de la page *Reactor* pour l`affichage des types de réacteurs alternatifs (Figure III.8).

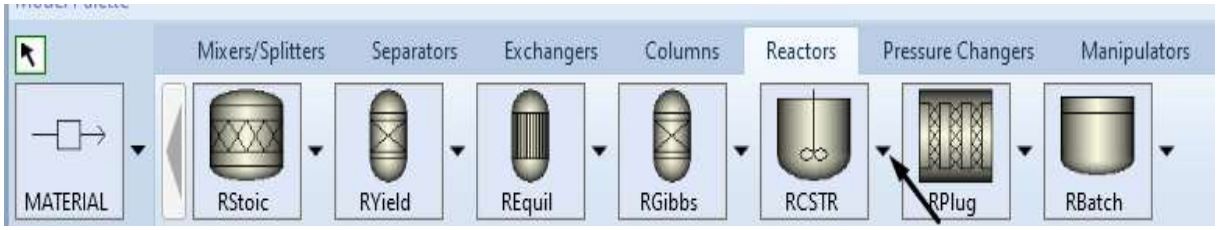



**Figure III-8 :** Types des réacteurs.

Cliquons sur la flèche à droite du type *RCSTR*, ensuit, nous définissons l'un des symboles et nous déplaçons le pointeur sur la feuille de flux vierge. Cliquez sur inserts du schéma de flux CSTR (Figure III.9). De nombreux CSTR peuvent être installés en continuant à cliquer sur le schéma de fonctionnement. Pour arrêter d'ajouter des unités, cliquez sur la flèche à gauche au bas de la fenêtre, cela annule le mode d'entrée. La masse du réacteur peut être renommée en cliquant sur l'icône Organigramme, cliquez sur le bouton droit et sélectionnez *Rename*.

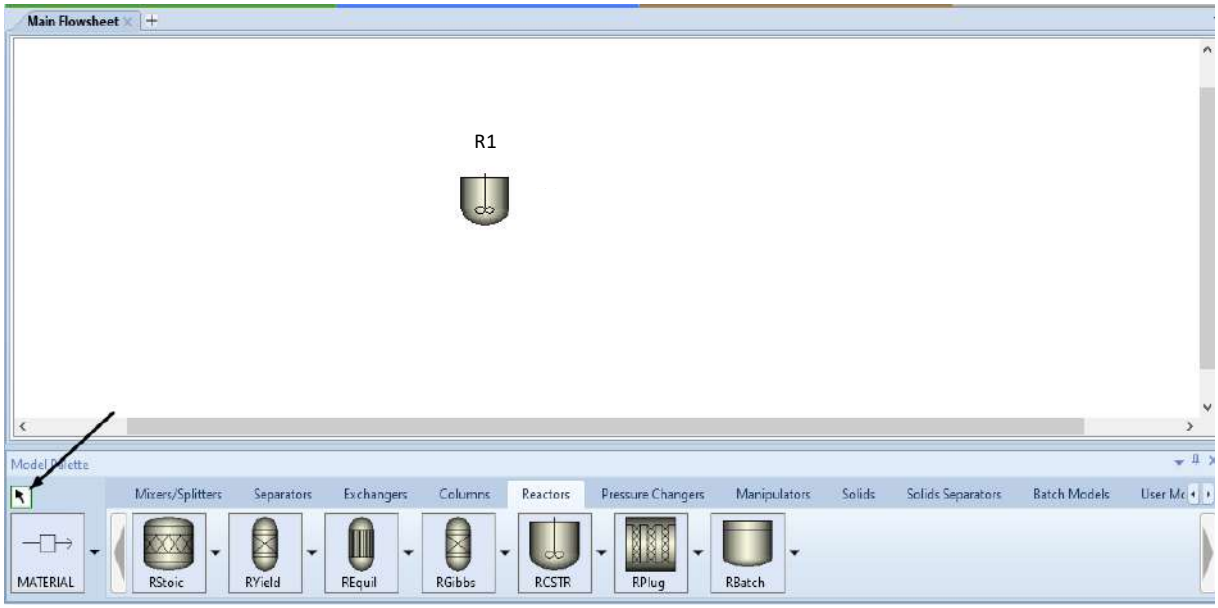



**Figure III-9** : Placer RCSTR sur le schéma.

Nous devons maintenant installer des gammes d'alimentation et des produits avec des vannes et une pompe. Cliquez sur l'onglet de la page *Pressure Changers* qui fournit des compresseurs, vannes et autres composants (figure III.10).

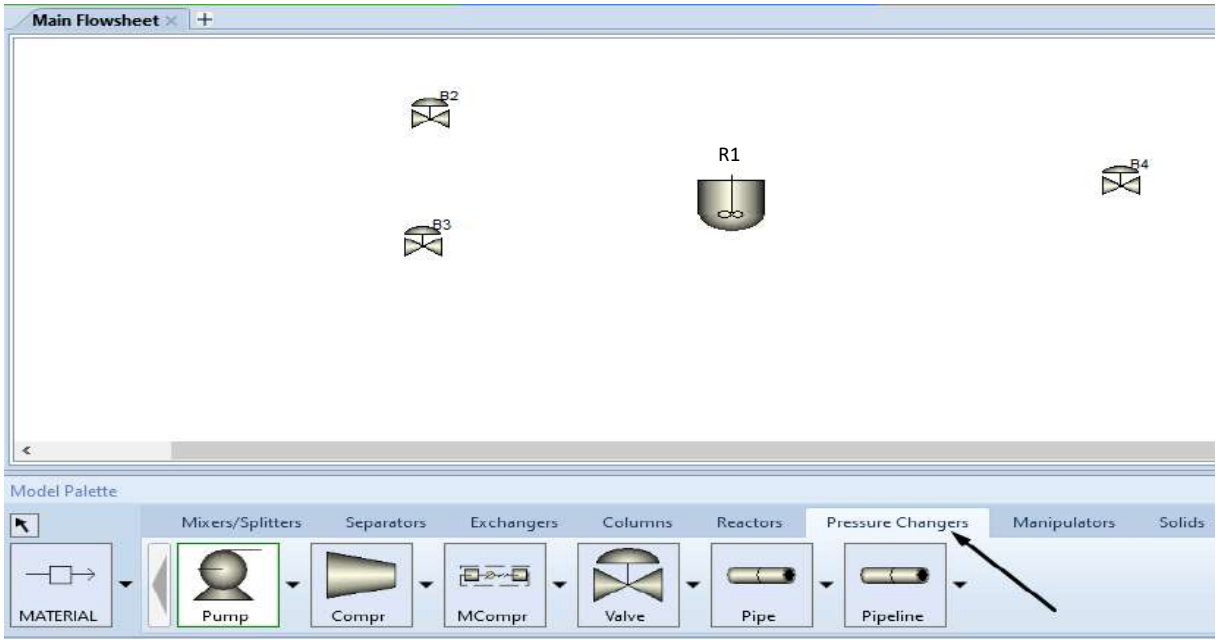



**Figure III-10 :** Installation des vannes.

Vous cliquez sur l'icône appropriée et ajoutez le dans l'appareil sur le schéma de principe. Le schéma de principe est produit par trois vannes figure III.11.

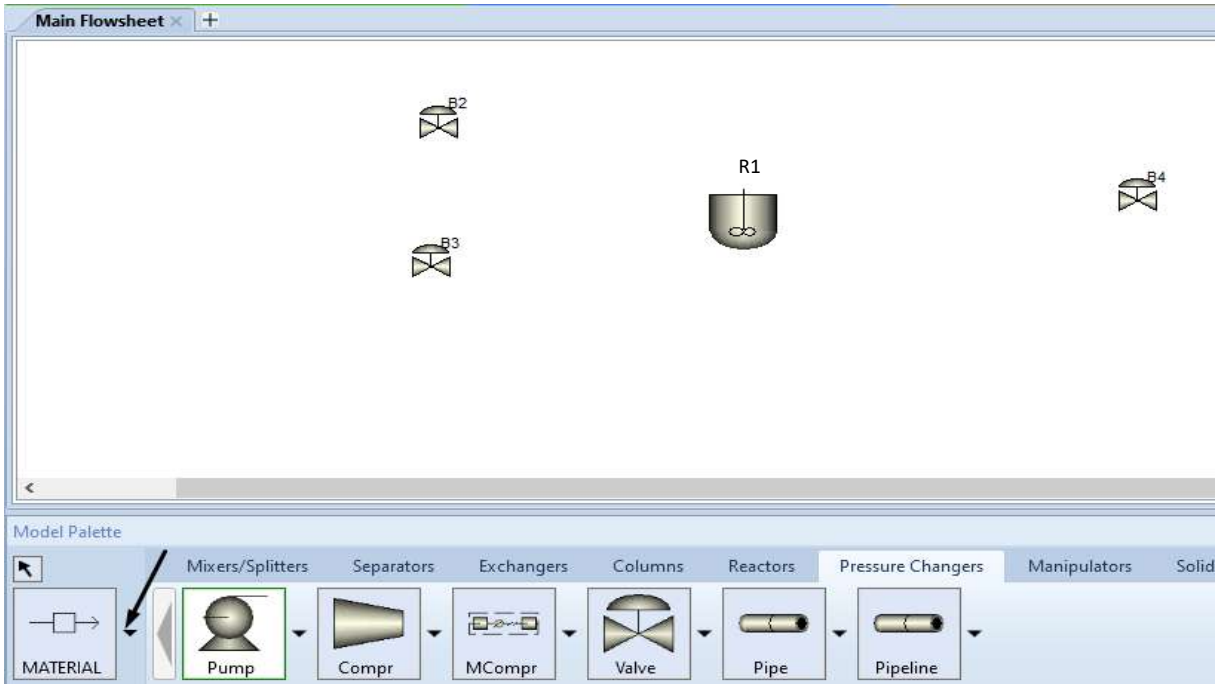



**Figure III-11** : Feuille de calcul avec équipement installé.

Pour installer des flux pour le matériau, les produits et les connexions intermédiaires, cliquez sur la flèche de la zone *Material Streams* en bas à gauche de la fenêtre et sélectionnez *Material.* Déplacer le curseur sur le schéma produit un certain nombre de flèches sur les entrées et les sorties des différents blocs. Un flux est installé en cliquant d'abord sur le schéma, puis en cliquant sur la flèche pointant vers une vanne d'alimentation. La figure III.12 montre le flux «1» connecté à vanne «V1».

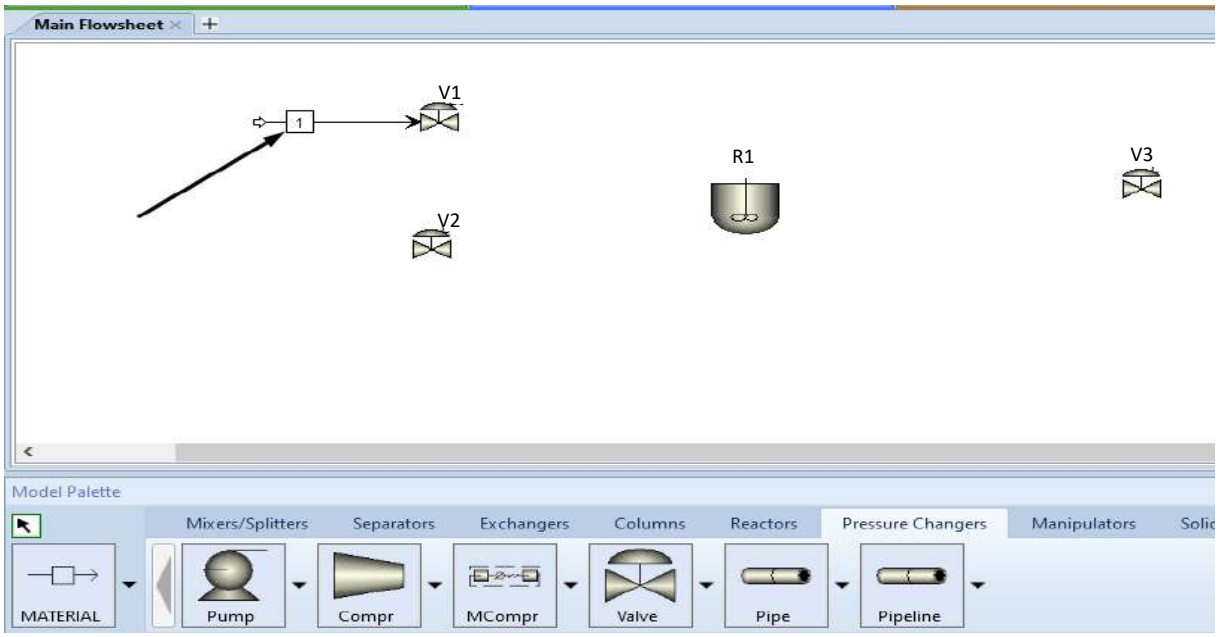



**Figure III-12** : Installation du flux de matériaux.

La figure III.13 montre le schéma final avec toutes les lignes installées et les flux renommés. Ensuite, enregistrez le fichier dans un répertoire approprié.

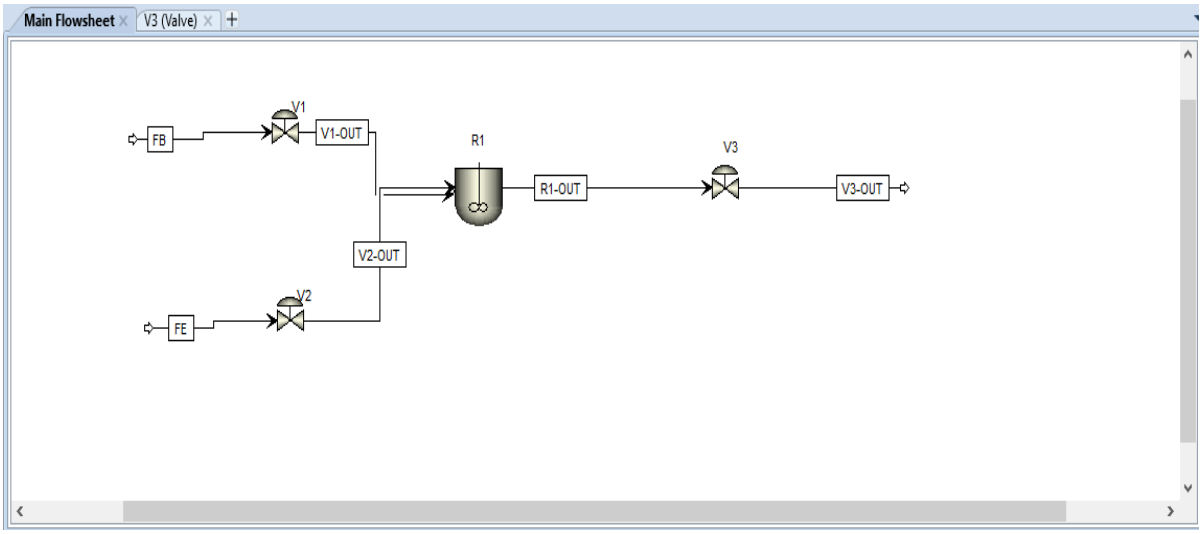



**Figure III-13** : Diagramme final

La figure III.14 montre les propriétés du flux d'entrée de benzène liquide.

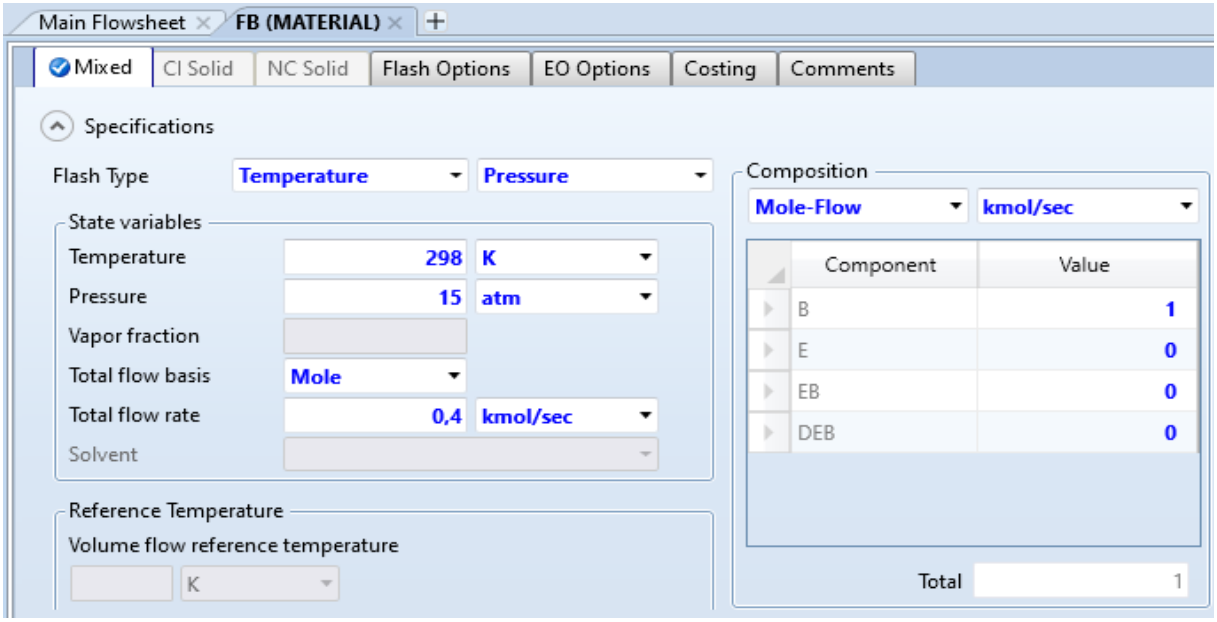



**Figure III-14 :** Propriétés du flux d'admission de benzène liquide en termes de T, P et de débit de composition.

La figure III.15 montre les propriétés du courant d'entrée de l'éthylène gazeux.

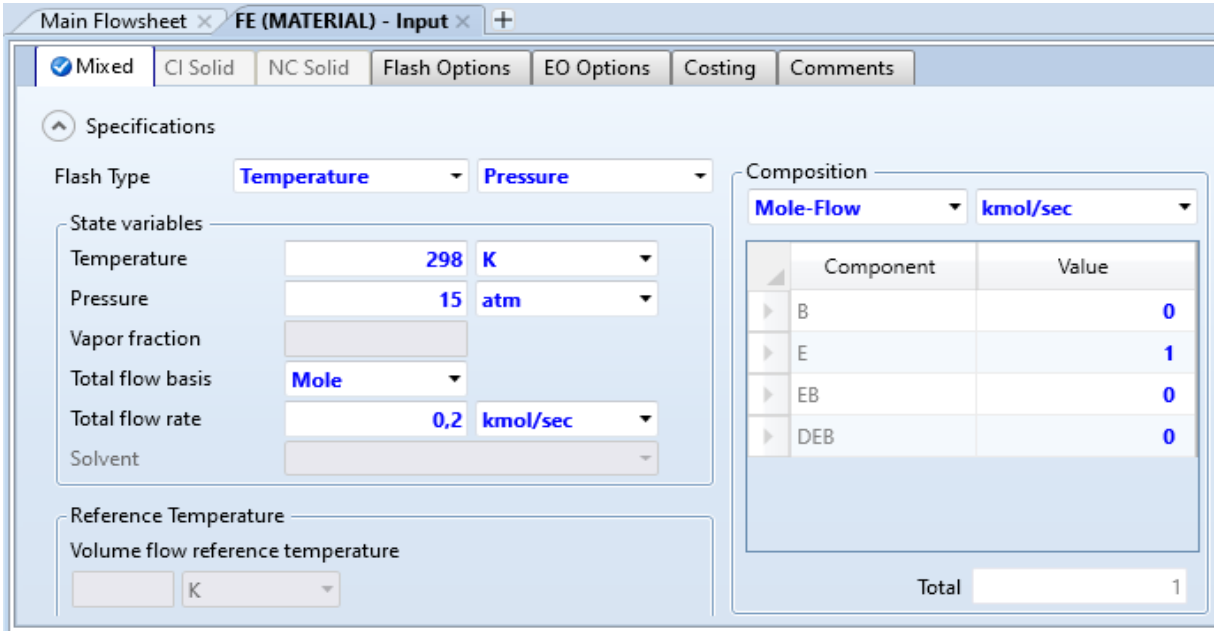



**Figure III-15** : Propriétés du flux d'entrée de gaz d'éthylène en termes de T, P et de débit de composition.

La figure III.16 montre les spécifications d'entrée « VALVE1 ». Les spécifications d'entrée «VALVE2 » sont identiques.

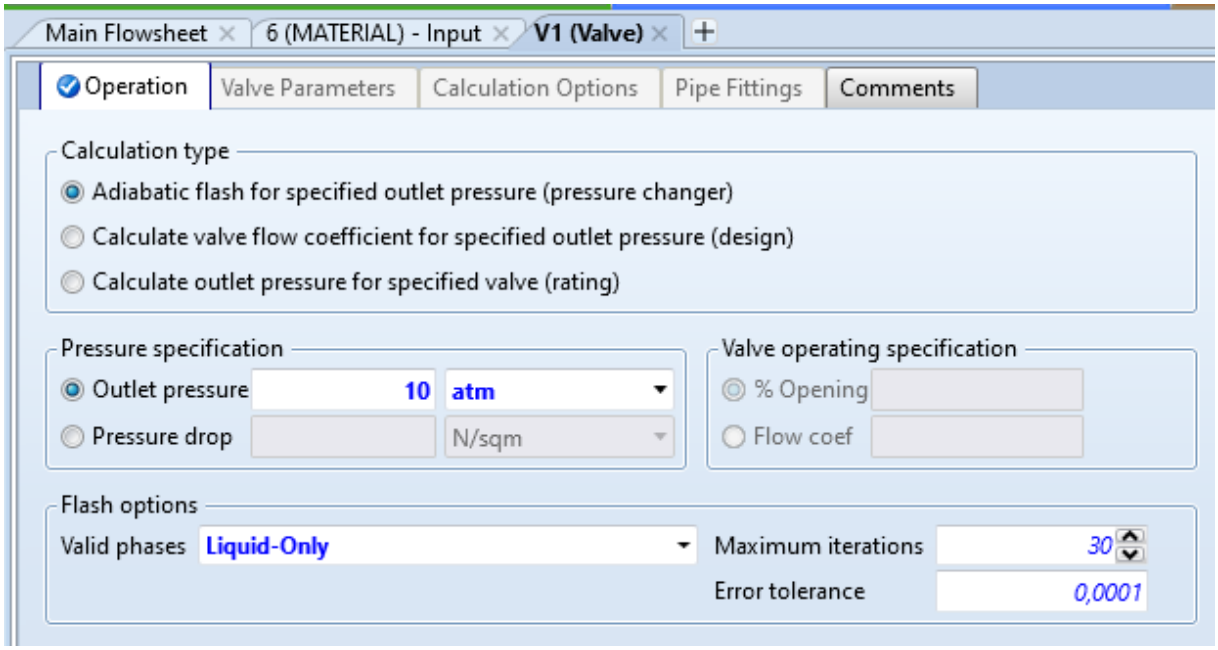



**Figure III-16** : Spécifications d'entrée «VALVE1» et «VALVE2», ou la chute de pression est réglée à 10 atm de sorte que la pression de sortie soit égale à celle du réacteur.

La figure III.17 montre les spécifications du bloc « VALVE3», où une chute de pression de 5 atm est supposée et *Valid phases* est réglé sur *Liquid – Only* . La sélection a été faite pour avoir une meilleure convergence de simulation.

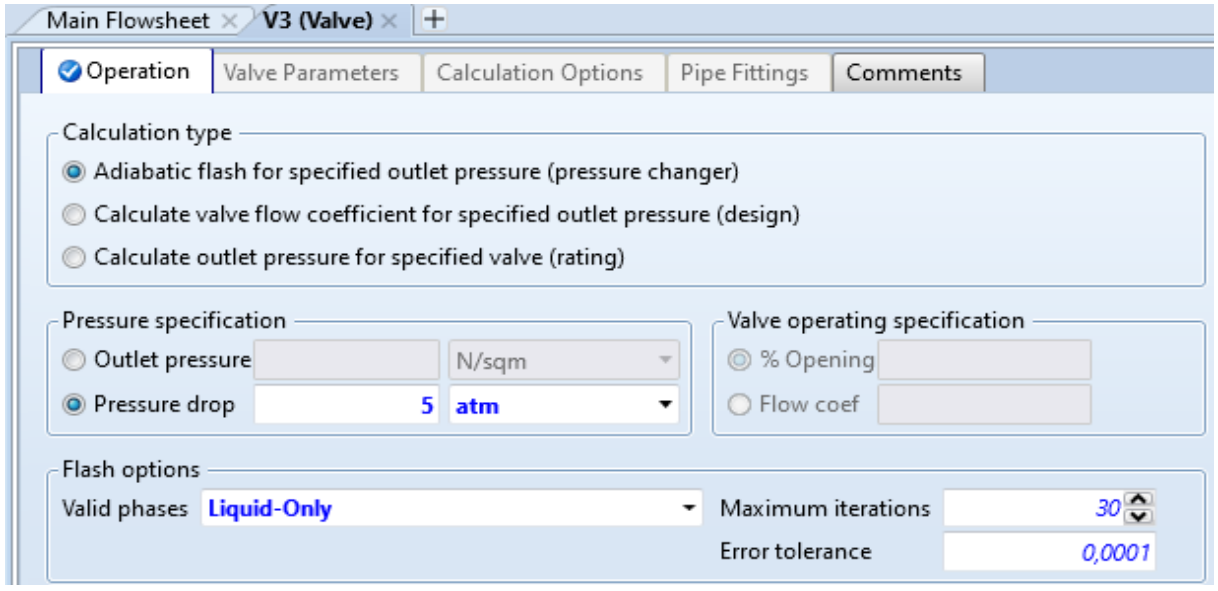



**Figure III-17** : Spécifications du bloc « VALVE3 », où une chute de pression est réglée sur 5 atm.

## III.5.2 Spécification des réactions

Cliquez sur *Reactions* dans la colonne à gauche de la fenêtre du *Data Browser*, puis cliquez à nouveau sur *Reactions*, figure III.18. Pour configurer une nouvelle réaction, cliquez sur *New*.

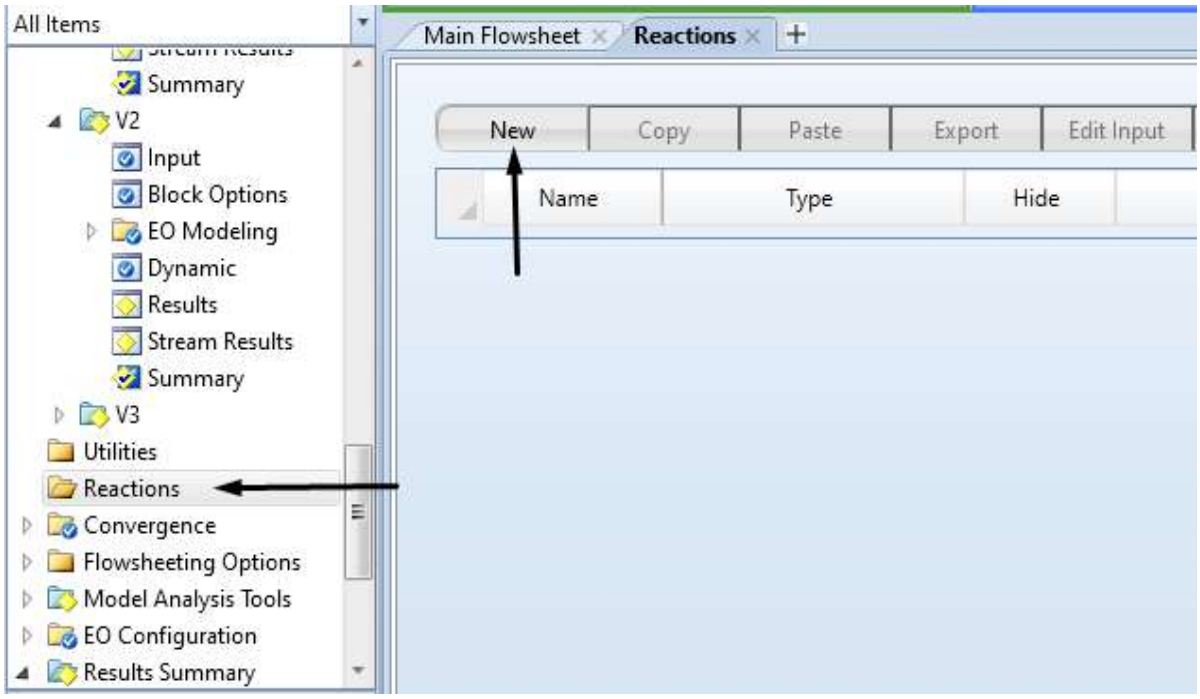



**Figure III-18** : Configuration des réactions.

La petite fenêtre illustrée à la figure III.19 s'ouvre sur laquelle un nom de réaction *R-1* est spécifié et le type de réaction est sélectionné. Les trois vitesses de réaction sont données sous forme de loi de puissance [Eq. (III.4); (III.5); (III.6)], donc *Powerlaw* est sélectionné .

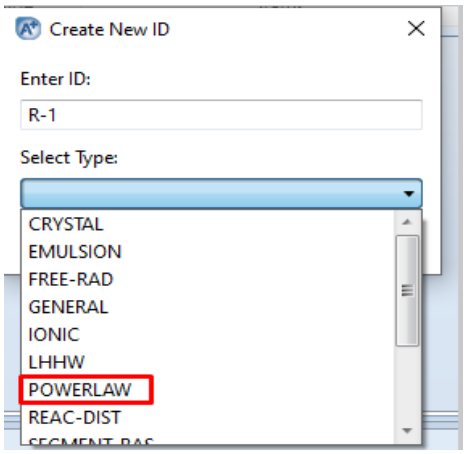



**Figure III-19 :** Taux de réaction selon la loi de puissance.

La fenêtre illustrée à la figure III.20 s'ouvre. Dans la case de *Reaction type*, sélectionnez *Kinetic*. Notez qu'il s'agit de la *Reaction* N°1, comme indiqué dans la case *Reaction No*. L'ensemble de réaction R-1 Contient les trois réactions (N°1, 2 et 3).

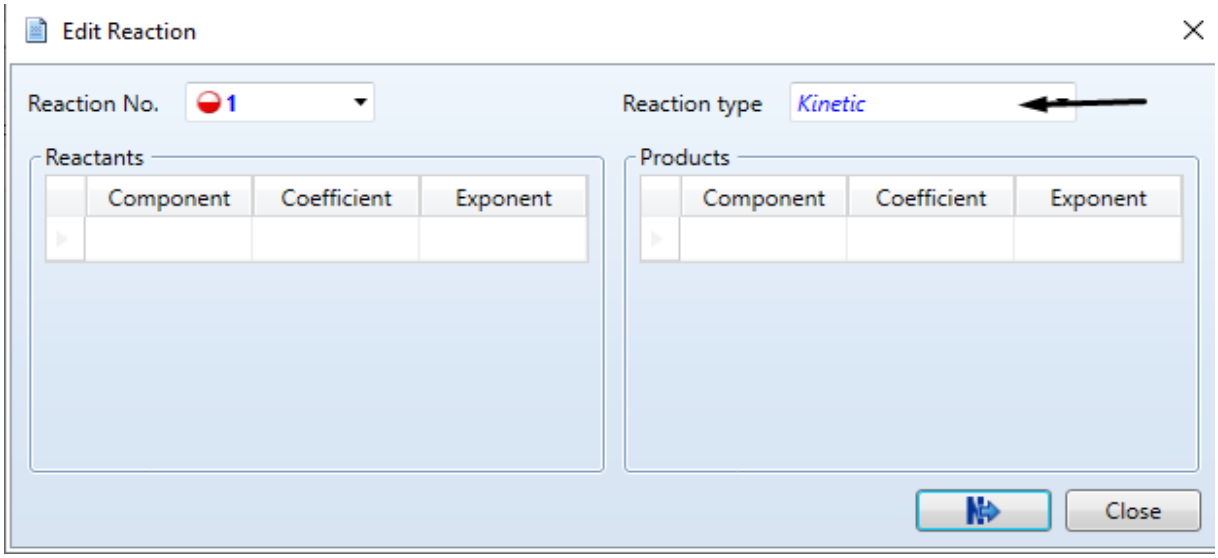



**Figure III-20 :** Spécification du type de réaction.

Cliquez sur la case *Reactant Components* et utilisez le menu déroulant pour sélectionner le composant "B" (benzène). Réglez le coefficient stœchiométrique sur « -1 » (le réactif est consommé) et *Exponent* sur «1» (réaction du premier ordre) (voir Fig. III.21). Répétez l'opération pour l'autre réactif "E" (éthylène). De la même manière, définissez-le produit comme «EB» avec un coefficient de 1 (produit dans la réaction). *Exponent* reste vide. Cliquez sur *Close*.

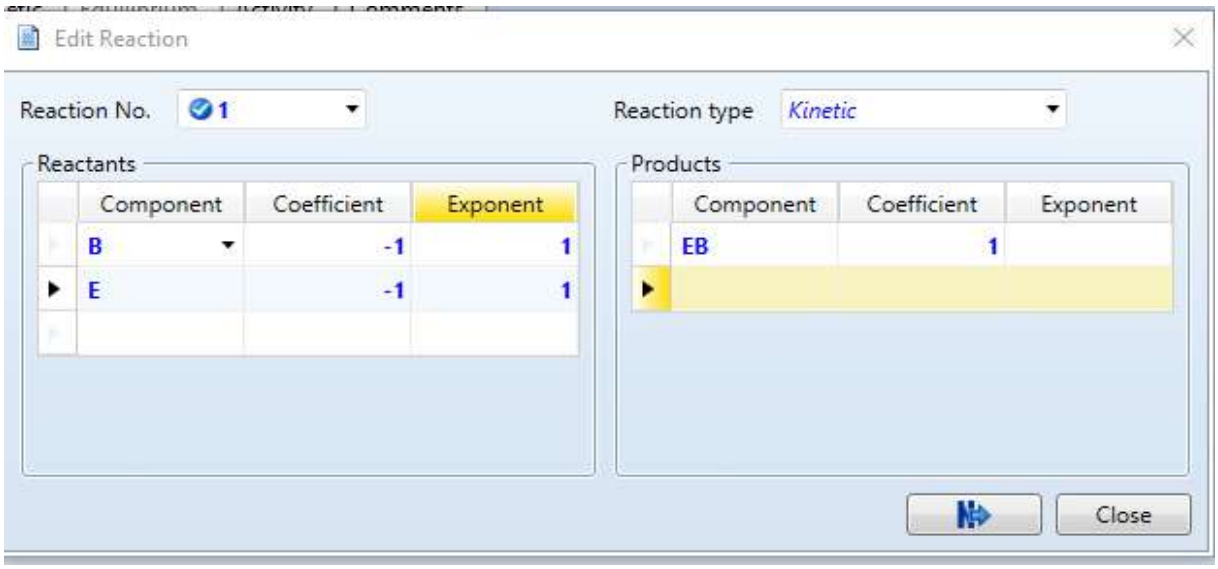



**Figure III-21**: Spécification des réactifs et des produits pour la première réaction.

Les deux autres réactions sont configurées de la même manière (voir Fig. III.22).

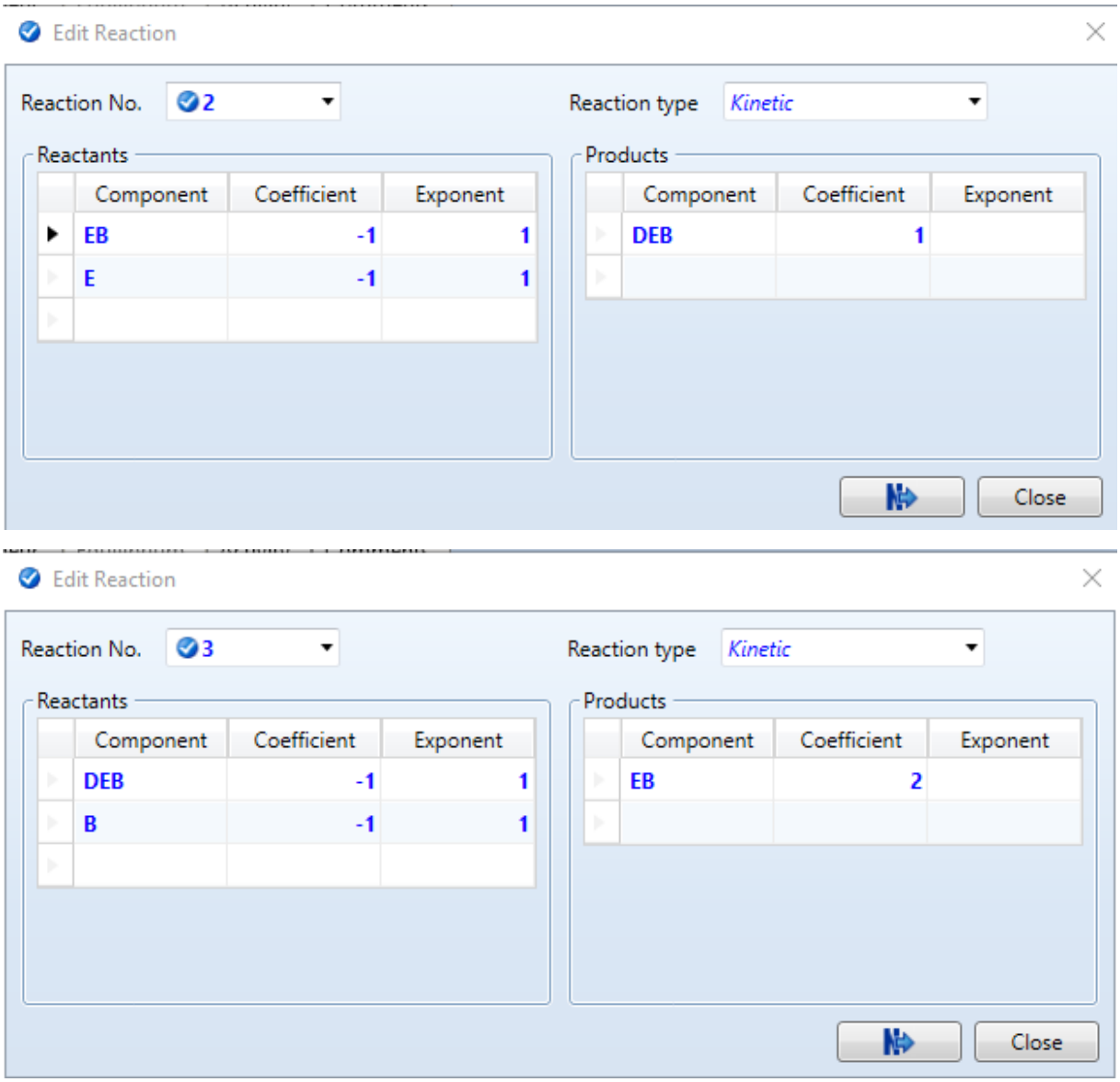



**Figure III-22**: Spécification des réactifs et des produits pour les deuxièmes et troisièmes réactions.

Cliquez sur l'onglet de la page *Kinetics* pour ouvrir la fenêtre illustrée sur la figure III.23. La flèche déroulante sur la première ligne vous permet de sélectionner l'une des trois réactions. Les paramètres cinétiques de la réaction «1» sont illustrés à la figure III.23. La phase de réaction est sélectionnée comme liquide. La base de taux est sélectionnée comme *React (vol).* La concentration basique *[Ci]basis* est sélectionnée comme *Molarity*. Les valeurs de k et E sont considérer comme des entrées. L'énergie d'activation peut être spécifiée dans plusieurs types d'unités différentes, mais le k doit avoir l`unités de kmol $s^{-1}$ $m^3$.

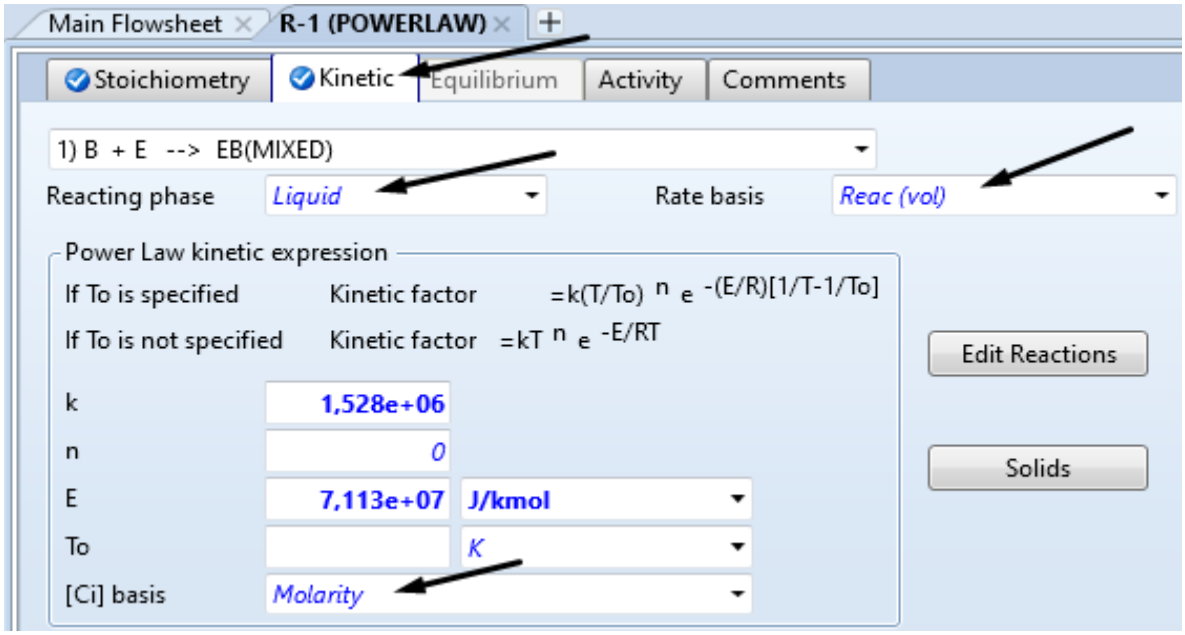



**Figure III-23** : Spécification des paramètres cinétiques pour la réaction 1.

Les paramètres cinétiques des deux autres réactions sont réglés de la même manière (voir les figures III.24 et III.25). Les réactions sont maintenant spécifiées et peuvent être utilisées dans le bloc réacteur (R1).

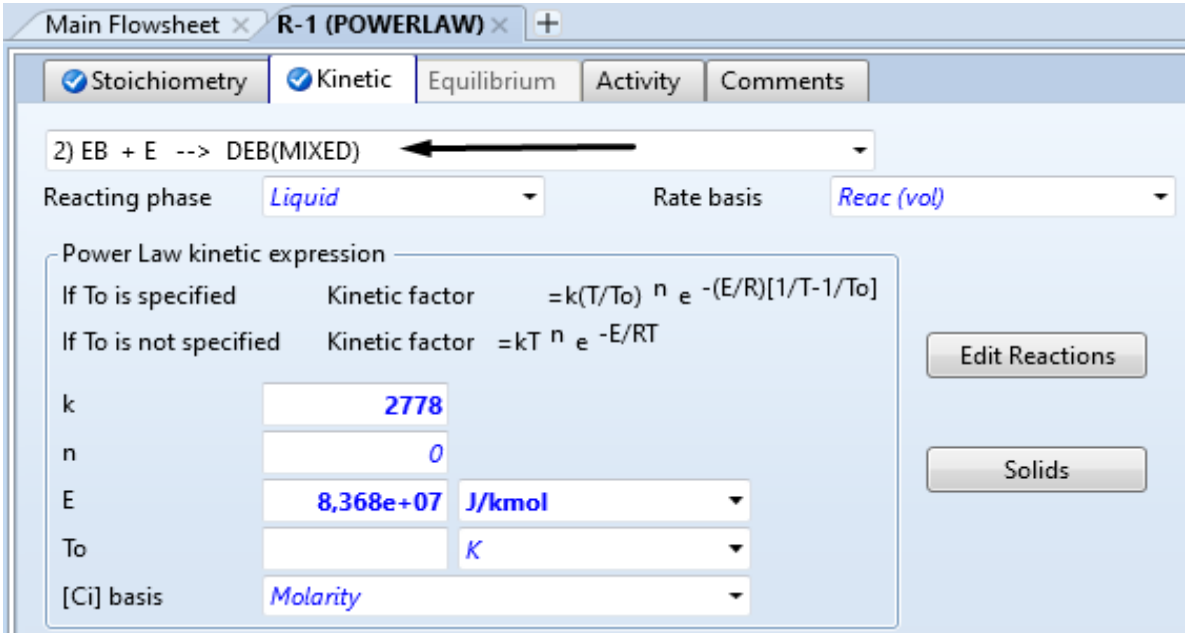



**Figure III-24** : Spécification des paramètres cinétiques pour la réaction 2.

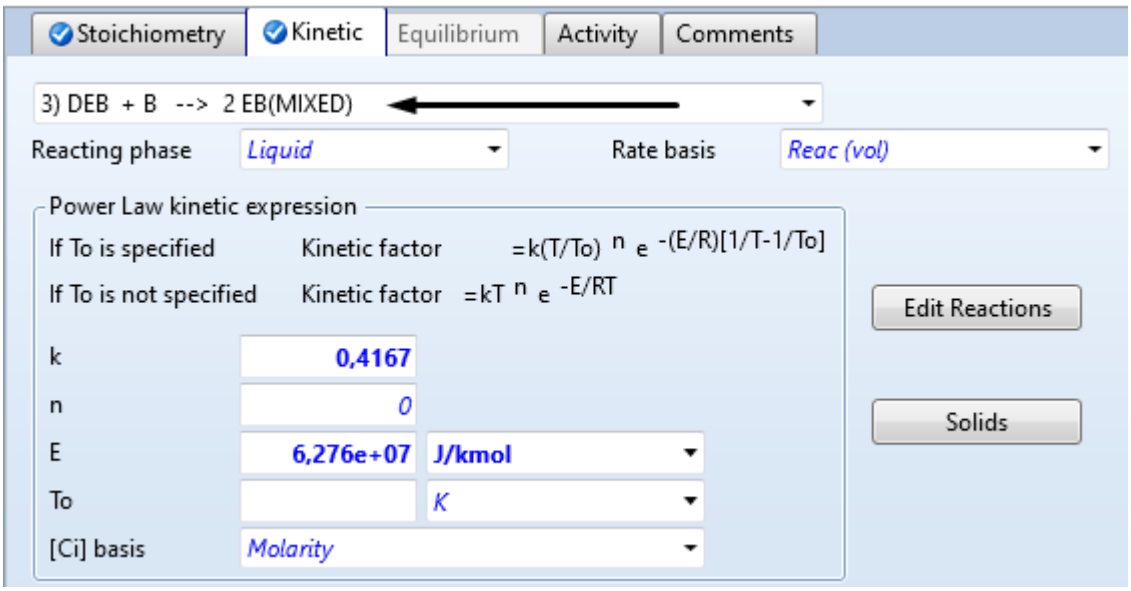



**Figure III-25** : Spécification des paramètres cinétiques pour la réaction 3.

## III.5.3 Configuration du réacteur

Cliquez sur le bloc réacteur puis sur *Setup*. La fenêtre illustrée à la figure III.26 s'ouvre sur laquelle la température et la pression de fonctionnement sont réglées, ainsi que le volume du réacteur et les phases valides (*Liquid-Only*). Au lieu de régler la température, d'autres options pourraient être sélectionnées tels que le taux de transfert de chaleur du réacteur.

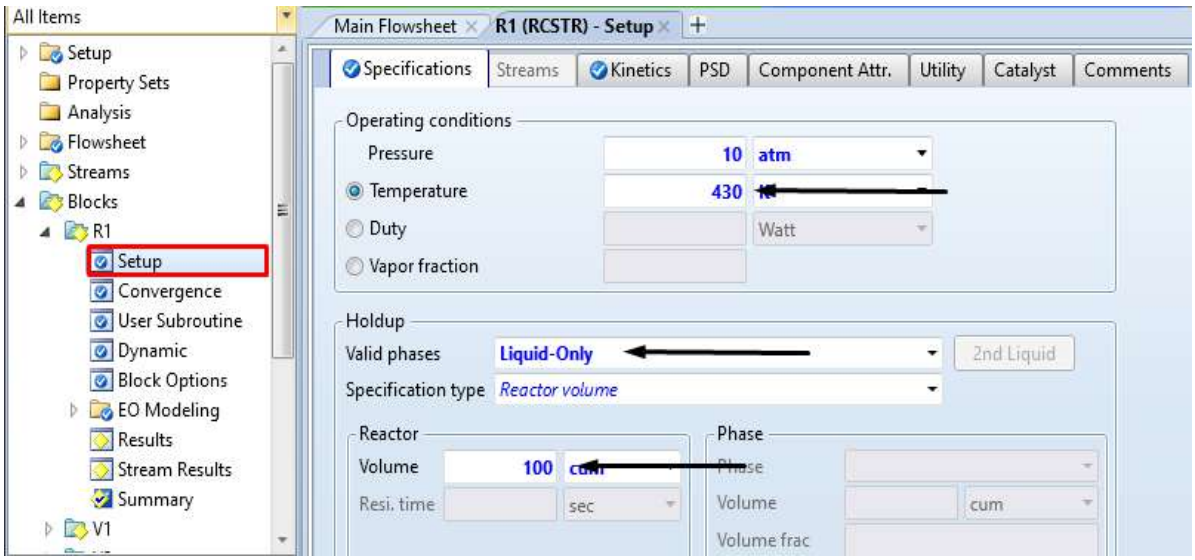



**Figure III-26** : Configuration des conditions et de la taille du réacteur.

Ensuite, la sélection de l'onglet de la page *Kinetics* figure III.27. La réaction R-1 est déplacée de la colonne de gauche (*Available*) vers la colonne de droite (*Selected*) à l'aide des flèches entre les deux colonnes.

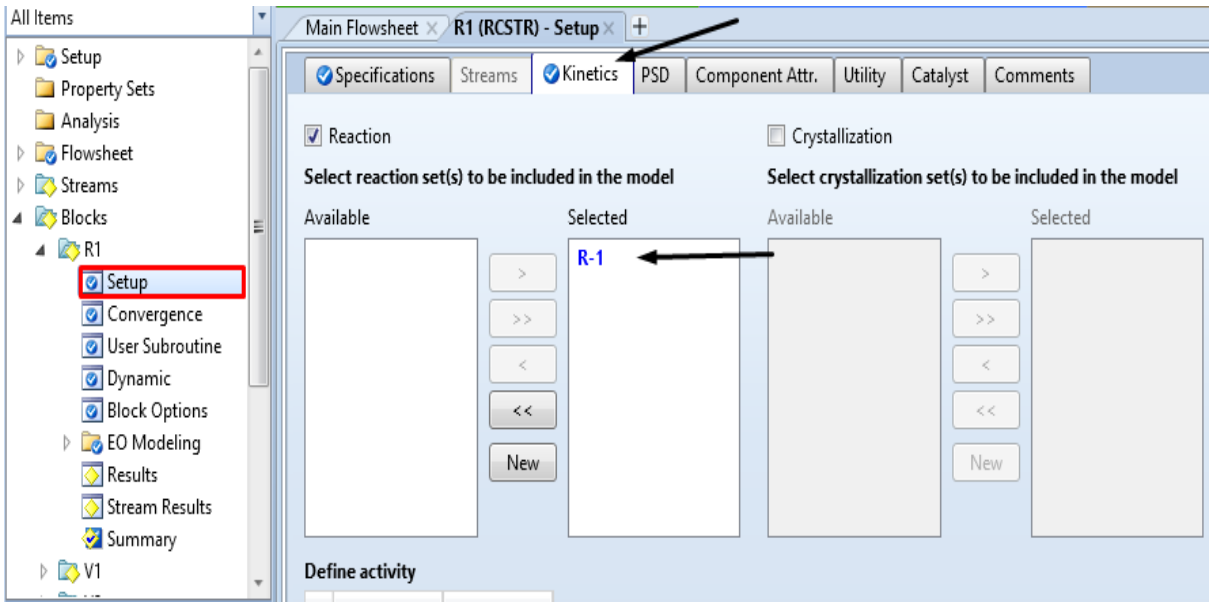



**Figure III-27 :** Sélection de la réaction R-1.

La simulation est maintenant complètement et prête au fonctionnement. Cliquez sur le bouton bleu *N* pour ouvrir la fenêtre illustrée à la figure III.28. Ensuite, cliquez sur le bouton *OK* et la simulation s'exécute.

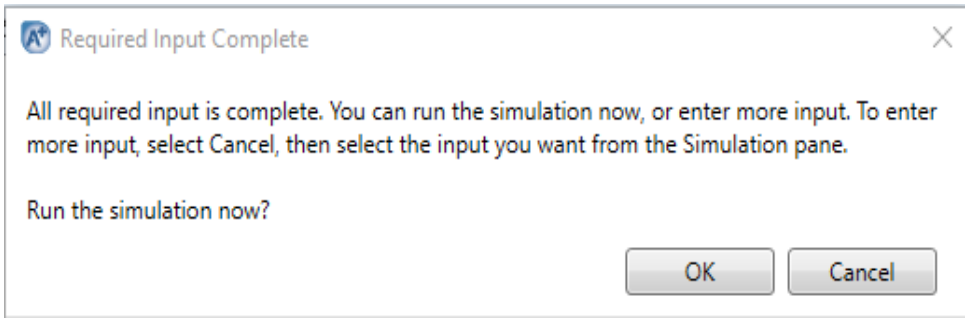



**Figure III-28** : Exécution de la simulation

Les flux d'entrée et de sortie du réacteur peuvent être vérifiés en cliquant sur *Stream Results*, figure III.29.

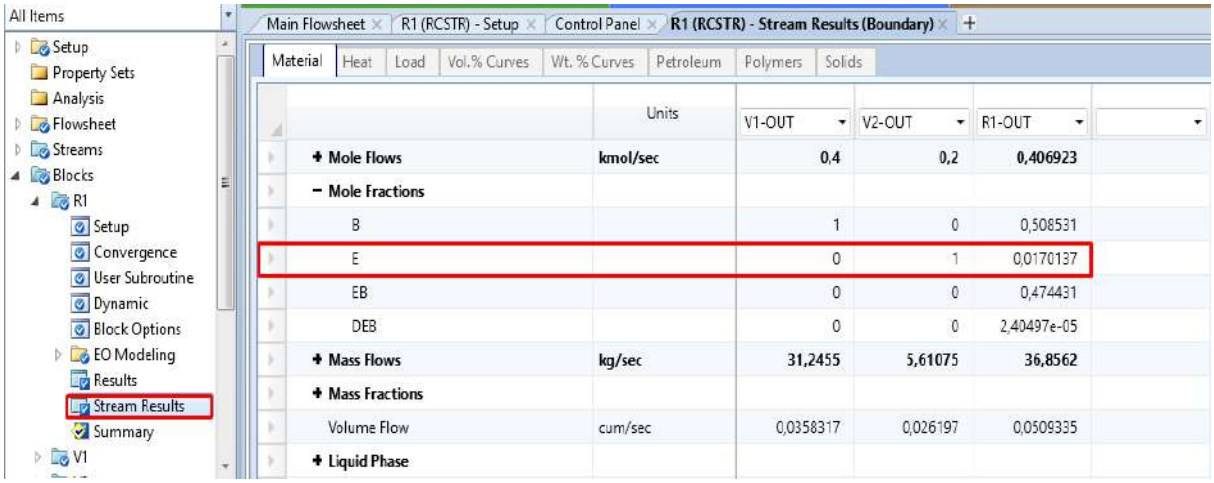



**Figure III-29** : Résultats de flux

## III.5.4 Résultats et discussion

### A. Optimisation du débit d'alimentation

Nous faisons d'abord l'optimisation du flux d'alimentation, pour cela nous devons fixer d'autres quantités comme la réaction, température et volume du réacteur. A partir de la revue de la littérature, nous avons une bonne idée sur le réacteur, température et volume du réacteur qui peuvent être des valeurs optimales ou non.

Prenons le débit d'alimentation de l'éthylène F (E) = 0,2 kmol / s, température du réacteur T (K) = 430 K et le volume du réacteur V = 100 $m^3$.

En faisant varier le débit de benzène F (B) = 0,1, 0,2, 0,3, 0,4, 0,5 et 0,6 (kmol / s), exécutez la simulation et les résultats de flux obtenus ont été mentionné dans le tableau III.1.

**Tableau III-1:** Comparaison entre le débit d'alimentation et le débit de produit.

| Débit d'alimentation (kmol/s) | | Débit de produit (kmol/s) | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| Benzène | Éthylène | Benzène | Éthylène | Éthylbenzène | Diéthylbenzène |
| 0,1 | 0,2 | 0,002 | 0,101 | 0,098 | 0,0003 |
| 0,2 | 0,2 | 0,021 | 0,021 | 0,179 | $8,09\ 10^{-5}$ |
| 0,3 | 0,2 | 0,108 | 0,008 | 0,192 | $1,85\ 10^{-5}$ |
| 0,4 | 0,2 | 0,207 | 0,007 | 0,193 | $9,79\ 10^{-6}$ |
| 0,5 | 0,2 | 0,307 | 0,007 | 0,193 | $6,60\ 10^{-6}$ |
| 0,6 | 0,2 | 0,407 | 0,007 | 0,193 | $4,96\ 10^{-6}$ |

**Tableau III-2:** Comparaison entre le débit d'alimentation et la fraction molaire du produit.

| Debit d'alimentation (kmol/s) | | Fraction molaire du produit | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| Benzène | Éthylène | Benzène | Éthylène | Éthylbenzène | Diéthylbenzène |
| 0,1 | 0,2 | 0,008 | 0,503 | 0,487 | 0,0016 |
| 0,2 | 0,2 | 0,097 | 0,096 | 0,807 | 0,0004 |
| 0,3 | 0,2 | 0,351 | 0,026 | 0,622 | $6{,}00\ 10^{-5}$ |
| 0,4 | 0,2 | 0,509 | 0,017 | 0,474 | $2{,}40\ 10^{-5}$ |
| 0,5 | 0,2 | 0,605 | 0,014 | 0,381 | $1{,}30\ 10^{-5}$ |
| 0,6 | 0,2 | 0,671 | 0,012 | 0,318 | $8{,}17\ 10^{-6}$ |

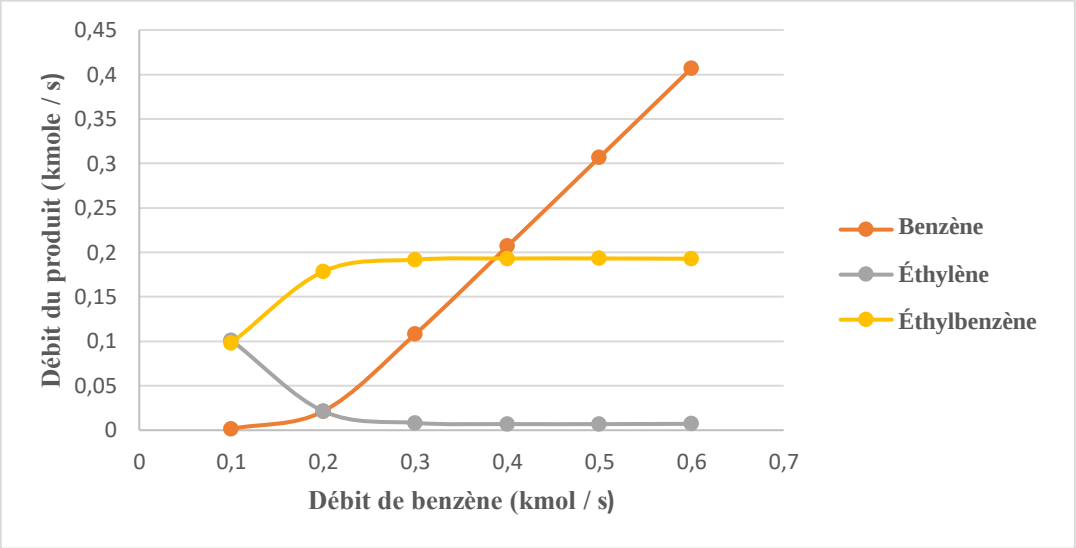



**Figure III-30:** Débit d'alimentation vs débit de produit.

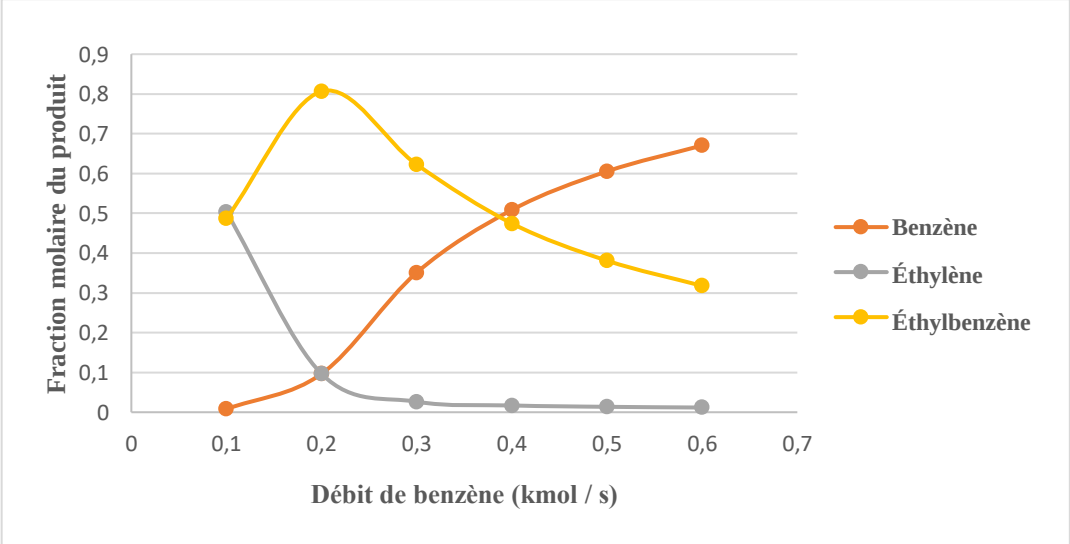



**Figure III-31:** Débit d'alimentation vs fraction molaire du produit.

**Tableau III-3:** Comparaison entre le débit de benzène avec la fraction molaire de di-éthylbenzène.

| Débit de Benzène (kmol/s) | Fraction molaire de Diéthylbenzène |
|---|---|
| 0,1 | 0,0016 |
| 0,2 | 0,0004 |
| 0,3 | $6{,}00\ 10^{-5}$ |
| 0,4 | $2{,}40\ 10^{-5}$ |
| 0,5 | $1{,}30\ 10^{-5}$ |
| 0,6 | $8{,}17\ 10^{-6}$ |

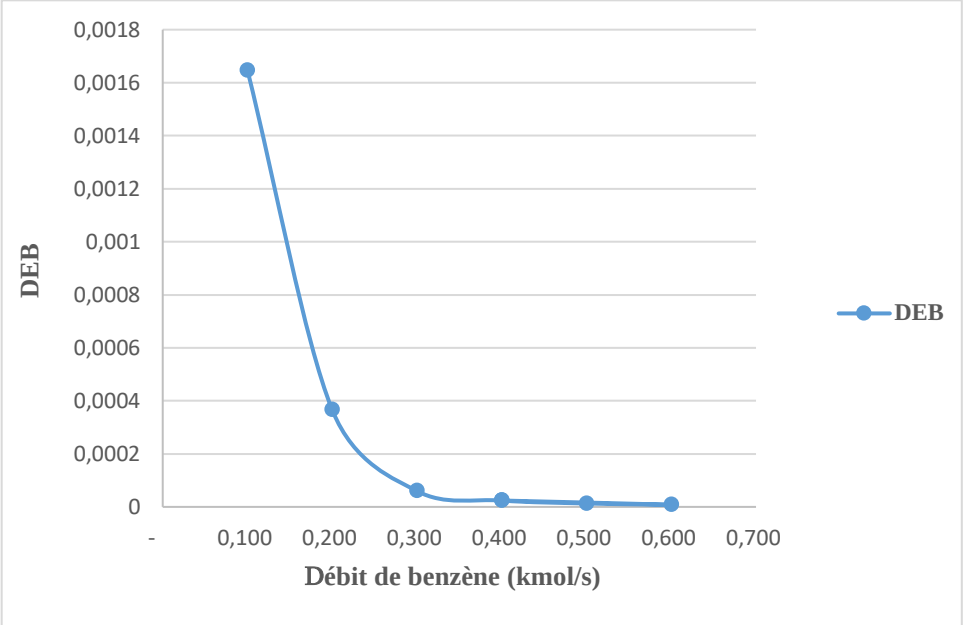



**Figure III-32:** Débit de benzène (kmol/s) en fonction de la fraction molaire du produit (DEB)

- **Inférences des tableaux et graphiques**

En analysant soigneusement les tableaux et les graphes, nous aurons les conclusions suivantes.

L'augmentation du débit d'alimentation en benzène jusqu'à 0,4 kmol / s conduit à la maximisation du produit. L`augmentation du débit d'alimentation plus de 0,4 Kmol / s n'a aucun effet sur la formation du produit par contre s`augmente le coût de séparation. Ainsi, la combinaison optimale de débit d'alimentation du benzène est F (B) = 0,4 kmol / s et l'éthylène est F (E) = 0,2 kmol / s.

## B. Optimisation de la température du réacteur

De la même manière que que l`opération précèdent, nous fixons le débit d'alimentation du benzène F (B) = 0,4 et de l'éthylène F (E) = 0,2 kmol /s et volume du réacteur V ($m^3$) = 100.

En faisant varier la température du réacteur T (k) = 410, 420, 430, 440, 450, 460, 470 et 480, exécutez la simulation et les résultats de flux obtenus ont été présentés dans le tableau III.4.

**Tableau III-4:** Comparaison entre la température du réacteur et le débit du produit.

| Temperature (K) | Débit du produit (kmol/s) | | | |
|---|---|---|---|---|
| | Benzène | Éthylène | Éthylbenzène | Diéthylbenzène |
| 410 | 0,216 | 0,016 | 0,184 | $7{,}18\ 10^{-6}$ |
| 420 | 0,210 | 0,010 | 0,190 | $8{,}53\ 10^{-6}$ |
| 430 | 0,207 | 0,007 | 0,193 | $9{,}79\ 10^{-6}$ |
| 440 | 0,205 | 0,005 | 0,195 | $1{,}10\ 10^{-5}$ |
| 450 | 0,203 | 0,003 | 0,197 | $1{,}21\ 10^{-5}$ |
| 460 | 0,202 | 0,002 | 0,198 | $1{,}32\ 10^{-5}$ |
| 470 | 0,202 | 0,002 | 0,198 | $1{,}43\ 10^{-5}$ |
| 480 | 0,201 | 0,001 | 0,199 | $1{,}54\ 10^{-5}$ |

**Tableau III-5:** Comparaison entre la température du réacteur et la fraction molaire du produit.

| Témperature (K) | Fraction molaire du produit | | | |
|---|---|---|---|---|
| | Benzène | Éthylène | Éthylbenzène | Diéthylbenzène |
| 410 | 0,519 | 0,038 | 0,442 | $1{,}73\ 10^{-5}$ |
| 420 | 0,513 | 0,025 | 0,462 | $2{,}08\ 10^{-5}$ |
| 430 | 0,509 | 0,017 | 0,474 | $2{,}40\ 10^{-5}$ |
| 440 | 0,506 | 0,011 | 0,483 | $2{,}71\ 10^{-5}$ |
| 450 | 0,504 | 0,008 | 0,488 | $3{,}00\ 10^{-5}$ |
| 460 | 0,503 | 0,005 | 0,492 | $3{,}29\ 10^{-5}$ |
| 470 | 0,502 | 0,004 | 0,494 | $3{,}56\ 10^{-5}$ |
| 480 | 0,501 | 0,003 | 0,496 | $3{,}84\ 10^{-5}$ |

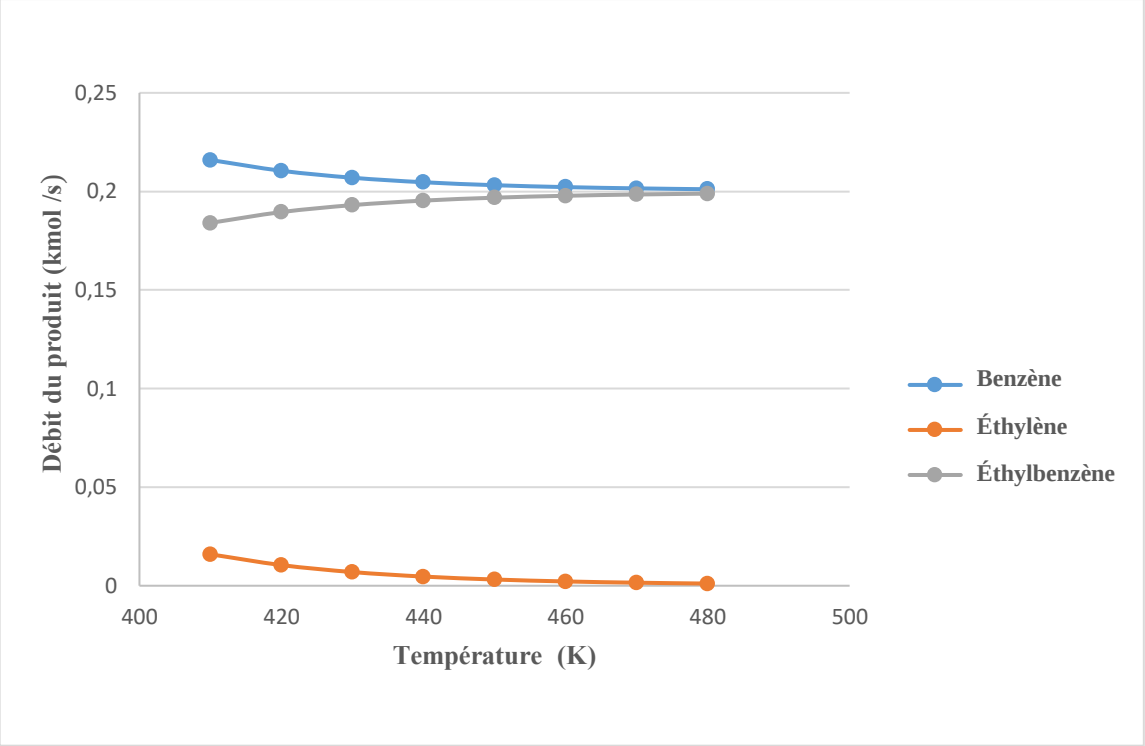



**Figure III-33:** Température du réacteur vs débit du produit.

**Tableau III-6:** Comparaison entre la température du réacteur avec la fraction molaire de di-éthylbenzène.

| Température (K) | Fraction molaire de Diéthylbenzène. |
|---|---|
| 410 | $1{,}73\ 10^{-5}$ |
| 420 | $2{,}08\ 10^{-5}$ |
| 430 | $2{,}40\ 10^{-5}$ |
| 440 | $2{,}71\ 10^{-5}$ |
| 450 | $3{,}00\ 10^{-5}$ |
| 460 | $3{,}29\ 10^{-5}$ |
| 470 | $3{,}56\ 10^{-5}$ |
| 480 | $3{,}84\ 10^{-5}$ |

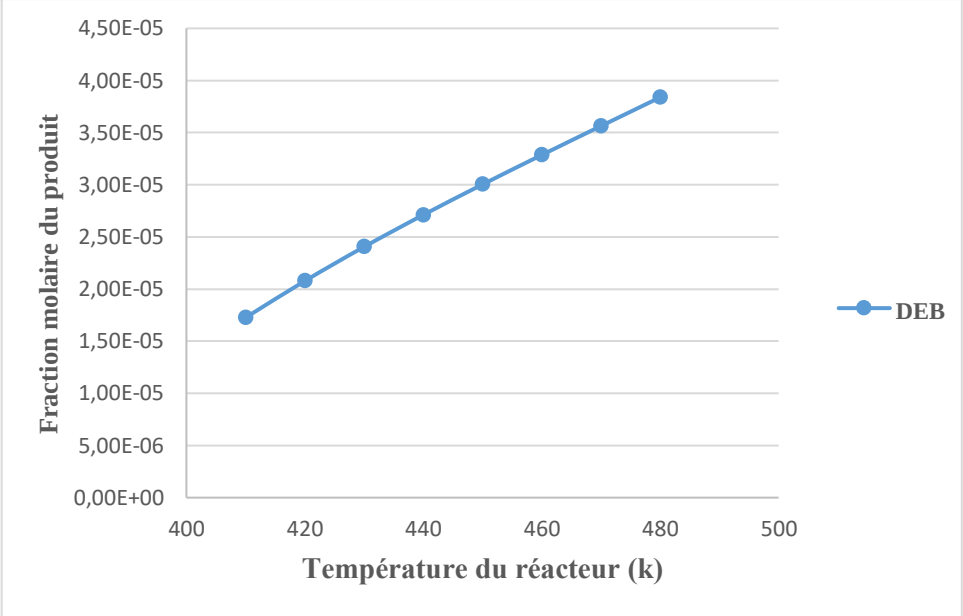



**Figure III-34:** Température du réacteur vs fraction molaire du produit (DEB).

- **Inférences à partir des graphiques et des tableaux**

En analysant soigneusement les tableaux et les graphes, nous aurons les conclusions suivantes.

En augmentant la température du réacteur, on favorise la formation du produit, c'est-à-dire l'éthylbenzène et l'augmentation de la température peut également favoriser la formation d'un produit indésirable, à savoir le di-éthylbenzène.

La température optimale du réacteur est donc T (k) = 430 K.

## C. Optimisation du volume du réacteur

De la même manière que le choix de température optimal, nous fixons le débit d'alimentation du benzène F (B) = 0,4 et Éthylène F (E) = 0,2 kmol /s, température du réacteur T (K) = 430 K.

En faisant varier le volume du réacteur V ($m^3$) = 60, 80, 100, 120 et 140, l'exécution et la simulation pour obtenir le résultat du flux a été tabulé comme suit.

**Tableau III-7:** Comparaison entre le volume du réacteur et le débit du produit.

| Volume ($m^3$) | Débit du produit (kmol/s) | | | |
|---|---|---|---|---|
| | Benzène | Éthylène | Éthylbenzène | Diéthylbenzène |
| 60 | 0,211 | 0,011 | 0,189 | $9{,}18\ 10^{-6}$ |
| 80 | 0,209 | 0,009 | 0,191 | $9{,}55\ 10^{-6}$ |
| 100 | 0,207 | 0,007 | 0,193 | $9{,}79\ 10^{-6}$ |
| 120 | 0,206 | 0,006 | 0,194 | $9{,}95\ 10^{-6}$ |
| 140 | 0,205 | 0,005 | 0,195 | $1{,}01\ 10^{-5}$ |

**Tableau III-8:** Comparaison entre le volume du réacteur et la fraction molaire du produit.

| Volume ($m^3$) | Fraction molaire du produit | | | |
|---|---|---|---|---|
| | Benzène | Éthylène | Éthylbenzène | Diéthylbenzène |
| 60 | 0,514 | 0,027 | 0,459 | $2{,}23\ 10^{-5}$ |
| 80 | 0,510 | 0,021 | 0,469 | $2{,}34\ 10^{-5}$ |
| 100 | 0,509 | 0,017 | 0,474 | $2{,}40\ 10^{-5}$ |
| 120 | 0,507 | 0,014 | 0,478 | $2{,}45\ 10^{-5}$ |
| 140 | 0,506 | 0,012 | 0,481 | $2{,}49\ 10^{-5}$ |

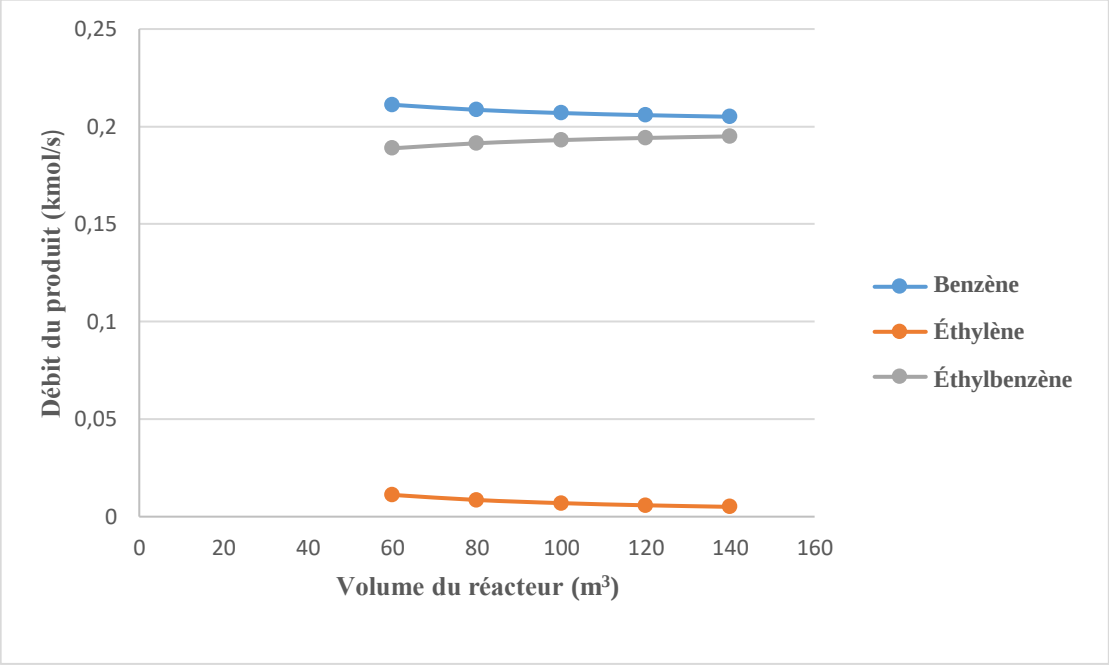



**Figure III-35:** Volume du réacteur vs débit du produit.

**Tableau III-9:** Comparaison du volume du réacteur avec la fraction molaire de di-éthylbenzène.

| volume ($m^3$) | Fraction molaire de Diéthylbenzène. |
|---|---|
| 60 | $2{,}23\ 10^{-5}$ |
| 80 | $2{,}34\ 10^{-5}$ |
| 100 | $2{,}40\ 10^{-5}$ |
| 120 | $2{,}45\ 10^{-5}$ |
| 140 | $2{,}49\ 10^{-5}$ |

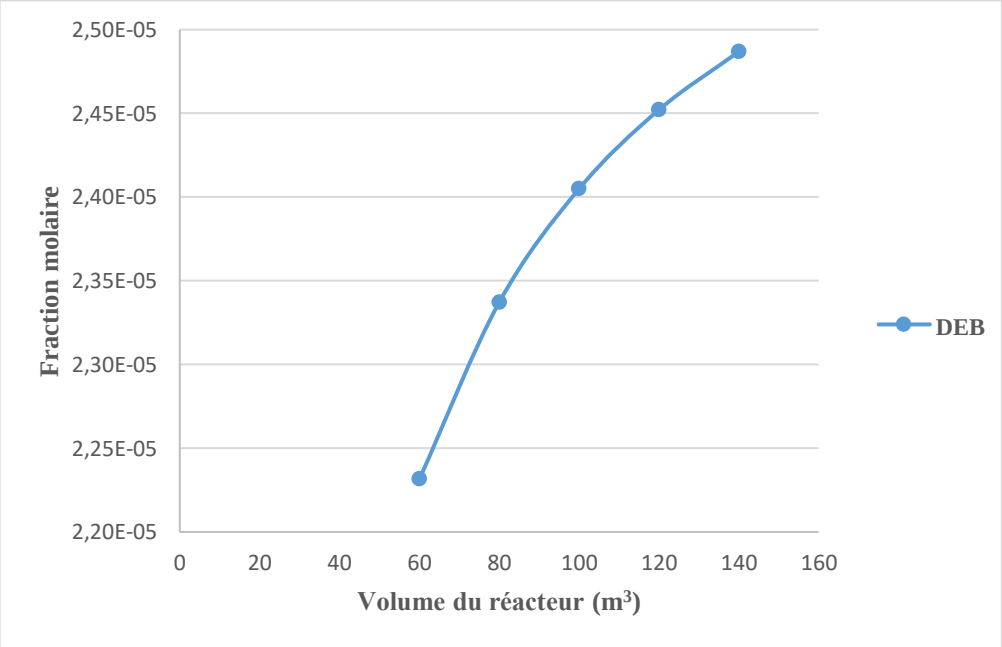



**Figure III-36:** Volume du réacteur vs DEB.

- **Inférences à partir de graphiques et de tableaux**

En analysant soigneusement les tableaux et les graphes, nous aurons les conclusions suivantes.

L'augmentation du volume du réacteur favorise la formation simultanée du produit souhaité et du produit indésirable. L'augmentation du volume du réacteur n'est pas également économiquement réalisable. Comme il s'agit d'une réaction exothermique, nous devons maintenir un volume de réacteur minimum pour le refroidissement, la température optimale du réacteur est donc T (K) = 430.

À partir de ci-dessus, nous aurons les valeurs optimales pour le débit d'alimentation, la température du réacteur et le volume du réacteur. Mettre ces valeurs optimales dans le plus et exécuter la simulation et obtenir le tableau de flux qui est montré ci-dessous.

**Tableau III-10 :** Résultant de flux pour la simulation d'état stable.

| Préparation de éthylbenzène. | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Courant | | FB | FE | R1-OUT | V1-OUT | V2-OUT | V3-OUT |
| Température | K | 298 | 298 | 430 | 298,22 | 372,20 | 430.095 |
| Pression | kpa | 1519875 | 1519875 | 1013250 | 1013250 | 1013250 | 506625 |
| Frac de vapeur | | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Flux de mole | kmol/s | 0,4 | 0,2 | 0,407 | 0,4 | 0,2 | 0.407 |
| Flux de masse | kg/s | 31,25 | 5,61 | 36,86 | 31,25 | 5,61 | 36.86 |
| Débit volumique | $m^3/s$ | 0,036 | 0,296 | 0,051 | 0,036 | 0,026 | 0,051 |
| Debit molaire | kmol/s | | | | | | |
| B | | 0,4 | 0 | 0,207 | 0,4 | 0 | 0.207 |
| E | | 0 | 0,2 | 0,007 | 0 | 0,2 | 0.007 |
| EB | | 0 | 0 | 0,193 | 0 | 0 | 0.193 |
| DEB | | 0 | 0 | $9,58\ 10^{-6}$ | 0 | 0 | $9,58\ 10^{-6}$ |
| Frac de mole | | | | | | | |
| B | | 1 | 0 | 0,509 | 1 | 0 | 0,509 |
| E | | 0 | 1 | 0,017 | 0 | 1 | 0,017 |
| EB | | 0 | 0 | 0,474 | 0 | 0 | 0,474 |
| DEB | | 0 | 0 | $2,40\ 10^{-5}$ | 0 | 0 | $2,40\ 10^{-5}$ |

## D. Simulation dans un réacteur CSTR en série

- **Organigramme pour CSTR en série**

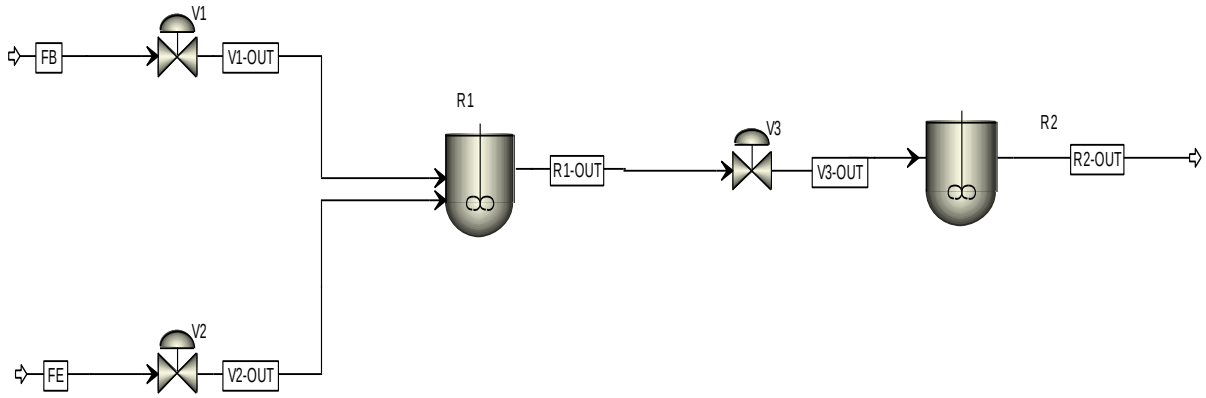



**Figure III-37 :** Schéma de principe pour la série CSTR.

On constate que le rapport de taille optimal de deux CSTR en série dépend de la cinétique de réaction et au niveau de la conversion.

Pour les réactions avec une cinétique de premier ordre, les CSTR de taille égale sont les meilleurs. Pour des réactions avec ordre supérieur à un, le CSTR de plus petite taille doit être suivi du plus grand et pour les réactions avec une commande inférieure à un, le CSTR de plus grande taille doit être suivi d'un autre de plus petite taille.

## E. Simulation pour un ratio de taille optimal

Ici, nous prenons deux réacteurs au lieu d'un seul réacteur ayant un volume combiné égal à volume d'un seul réacteur. Utilisez les mêmes valeurs optimales comme le débit d'alimentation, la température du réacteur est utilisée dans le cas précédent. Exécutez la simulation pour diverses combinaisons de volume de réacteur comme ((10,90), (20,80), (30,70), (40, 60), (50,50), (60,40), (70,30), (80,20), (90,10)) et obtenir les résultats du flux sont présentés comme suit.

**Tableau III-11 :** Comparaison entre les volumes du réacteur et le débit de produit.

| Volumes du réaction ($m^3$) | | Débit de produit (kmol/s) de R1 et R2 | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| R1 | R2 | R1 (B) | R1 (E) | R1 (EB) | R2 (B) | R2 (E) | R2 (EB) |
| 10 | 90 | 0,249 | 0,049 | 0,151 | 0,202 | 0,002 | 0,198 |
| 20 | 80 | 0,229 | 0,029 | 0,171 | 0,201 | 0,001 | 0,199 |
| 30 | 70 | 0,221 | 0,021 | 0,179 | 0,201 | 0,001 | 0,199 |
| 40 | 60 | 0,216 | 0,016 | 0,184 | 0,201 | 0,001 | 0,199 |
| 50 | 50 | 0,213 | 0,013 | 0,187 | 0,201 | 0,001 | 0,199 |
| 60 | 40 | 0,211 | 0,011 | 0,189 | 0,201 | 0,001 | 0,199 |
| 70 | 30 | 0,210 | 0,010 | 0,190 | 0,201 | 0,001 | 0,199 |
| 80 | 20 | 0,209 | 0,009 | 0,191 | 0,201 | 0,001 | 0,199 |
| 90 | 10 | 0,208 | 0,008 | 0,192 | 0,202 | 0,002 | 0,198 |

**Tableau III-12:** Comparaison entre les volumes du réacteur et la mole du produit de R1 et R2.

| Volumes du réaction ($m^3$) | | Fraction molaire de R1 et R2 | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| R1 | R2 | R1 (B) | R1 (E) | R1 (EB) | R2 (B) | R2 (E) | R2 (EB) |
| 10 | 90 | 0,555 | 0,109 | 0,336 | 0,502 | 0,005 | 0,493 |
| 20 | 80 | 0,533 | 0,068 | 0,399 | 0,502 | 0,003 | 0,495 |
| 30 | 70 | 0,525 | 0,049 | 0,426 | 0,501 | 0,003 | 0,496 |
| 40 | 60 | 0,519 | 0,039 | 0,442 | 0,501 | 0,002 | 0,497 |
| 50 | 50 | 0,516 | 0,032 | 0,452 | 0,501 | 0,002 | 0,497 |
| 60 | 40 | 0,514 | 0,027 | 0,459 | 0,501 | 0,002 | 0,496 |
| 70 | 30 | 0,512 | 0,024 | 0,465 | 0,501 | 0,003 | 0,496 |
| 80 | 20 | 0,510 | 0,0201 | 0,469 | 0,502 | 0,003 | 0,495 |
| 90 | 10 | 0,5094 | 0,0188 | 0,472 | 0,503 | 0,005 | 0,492 |

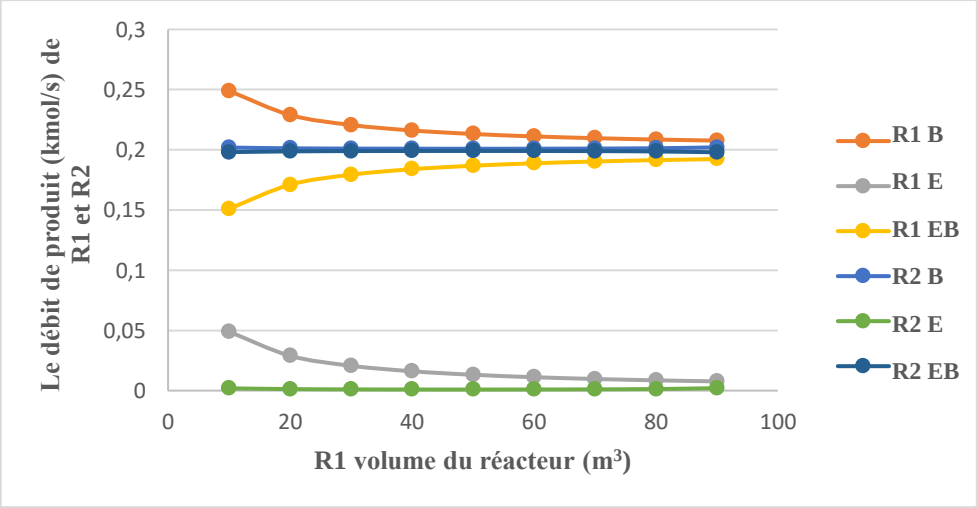



**Figure III-38:** R1 et courbes de débit de produit.

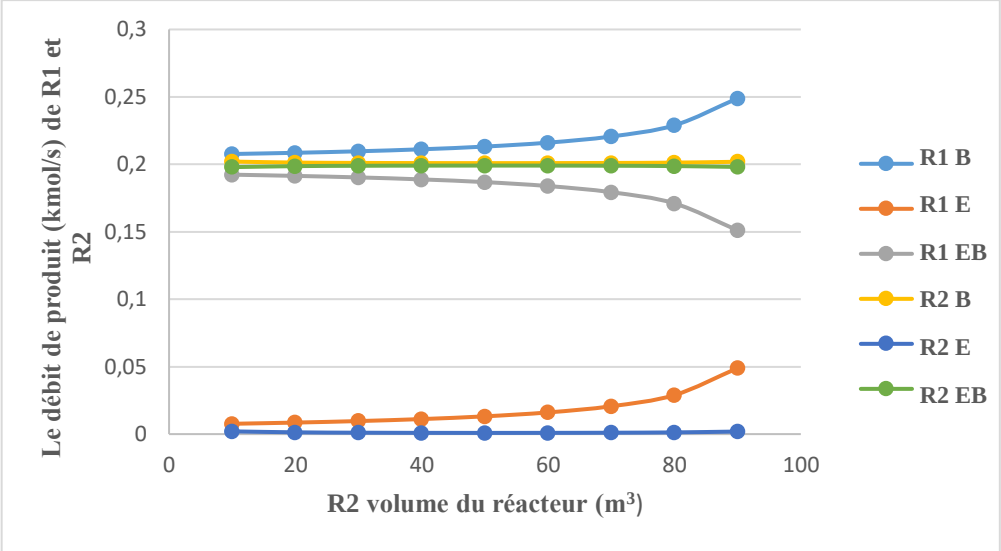



**Figure I-39:** R2 et courbes de débit de produit.

**Tableau III-13:** Comparaison entre R1 volume ($m^3$) et formation de DEB dans R1 et R2.

| R1 | R1 DEB | R2 DEB |
|---|---|---|
| 10 | $1{,}11\ 10^{-5}$ | $1{,}86\ 10^{-5}$ |
| 20 | $1{,}62\ 10^{-5}$ | $2{,}10\ 10^{-5}$ |
| 30 | $1{,}88\ 10^{-5}$ | $2{,}24\ 10^{-5}$ |
| 40 | $2{,}04\ 10^{-5}$ | $2{,}32\ 10^{-5}$ |
| 50 | $2{,}15\ 10^{-5}$ | $2{,}38\ 10^{-5}$ |
| 60 | $2{,}23\ 10^{-5}$ | $2{,}43\ 10^{-5}$ |
| 70 | $2{,}29\ 10^{-5}$ | $2{,}46\ 10^{-5}$ |
| 80 | $2{,}34\ 10^{-5}$ | $2{,}48\ 10^{-5}$ |
| 90 | $2{,}37\ 10^{-5}$ | $2{,}48\ 10^{-5}$ |

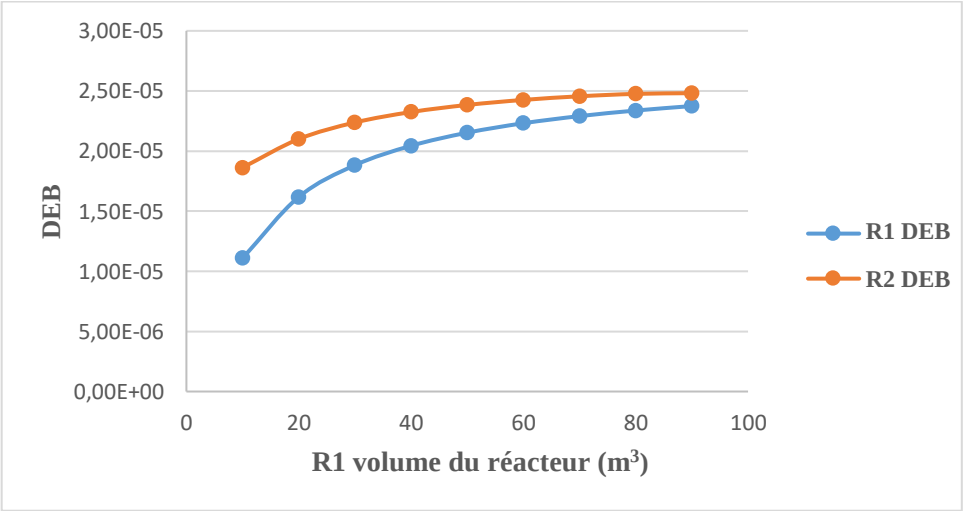



**Figure III-40:** Tracé entre le volume du réacteur R1 vs DEB.

**Tableau III-14:** Comparaison entre R2 volume ($m^3$) et formation de DEB dans R1 et R2.

| R2 | R1 DEB | R2 DEB |
|---|---|---|
| 90 | $1{,}11\ 10^{-5}$ | $1{,}86\ 10^{-5}$ |
| 80 | $1{,}62\ 10^{-5}$ | $2{,}10\ 10^{-5}$ |
| 70 | $1{,}88\ 10^{-5}$ | $2{,}24\ 10^{-5}$ |
| 60 | $2{,}04\ 10^{-5}$ | $2{,}32\ 10^{-5}$ |
| 50 | $2{,}15\ 10^{-5}$ | $2{,}38\ 10^{-5}$ |
| 40 | $2{,}23\ 10^{-5}$ | $2{,}43\ 10^{-5}$ |
| 30 | $2{,}29\ 10^{-5}$ | $2{,}46\ 10^{-5}$ |
| 20 | $2{,}34\ 10^{-5}$ | $2{,}48\ 10^{-5}$ |
| 10 | $2{,}37\ 10^{-5}$ | $2{,}48\ 10^{-5}$ |

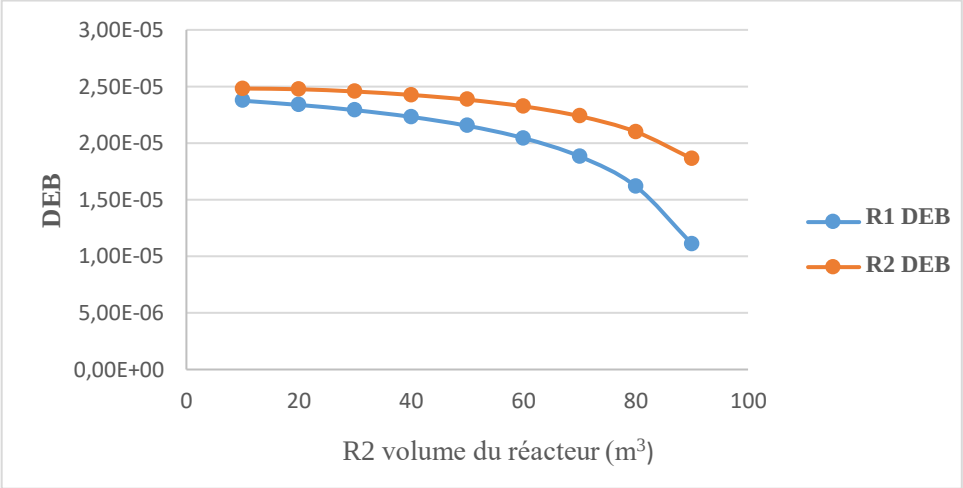



**Figure III-41:** Tracé entre le volume du réacteur R2 vs DEB.

## F. Inférences à partir de graphiques et de tableaux

En analysant soigneusement les tableaux de données et les graphes, nous aurons les conclusions suivantes.

Dans un premier temps, nous commençons la simulation avec le volume du réacteur R1 = 10 & R2 = 90 et avec l'augmentation le volume du réacteur R1 nous pouvons observer une augmentation de la formation de production. Augmentant encore le volume du réacteur au-delà d'une certaine limite, c'est-à-dire R1 = 40 ($m^3$), il favorise la formation de produit à savoir le di-éthylbenzène. La combinaison optimale de volume de réacteur est donc R1 = 40 et R2 = 60 $m^3$.

Mettez toutes ces valeurs et la simulation d'exécution, nous obtiendrons le tableau de flux suivant.

**Tableau III-15 :** Résultant de flux pour la simulation CSRT en série.

| Préparation de éthylbenzène | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Courant | | FB | FE | R1-OUT | R2-OUT | V1-OUT | V2-OUT | V3-OUT |
| Température | K | 298 | 298 | 430 | 430 | 298,22 | 372,20 | 124,881 |
| Pression | KPa | 1519875 | 1519875 | 1013250 | 1013250 | 1013250 | 1013250 | 10 |
| Frac de vapeur | | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 |
| Flux molaire | kmol/s | 0,4 | 0,2 | 0,416 | 0,401 | 0,4 | 0,2 | 0,416 |
| Flux de masse | kg/s | 31,25 | 5,61 | 36,86 | 36,86 | 31,25 | 5,61 | 36,86 |
| Débit volumique | $m^3/s$ | 0,036 | 0,296 | 0,051 | 0,051 | 0,036 | 0,026 | 1,687 |
| Flux molaire | kmol/s | | | | | | | |
| B | | 0,4 | 0 | 0,216 | 0,201 | 0,4 | 0 | 0,216 |
| E | | 0 | 0,2 | 0,016 | 0,001 | 0 | 0,2 | 0,016 |
| EB | | 0 | 0 | 0,184 | 0,199 | 0 | 0 | 0,184 |
| DEB | | 0 | 0 | $8,50\ 10^{-6}$ | $9,32\ 10^{-6}$ | 0 | 0 | $8,50\ 10^{-6}$ |
| Fractions molaire | | | | | | | | |
| B | | 1 | 0 | 0,519 | 0,501 | 1 | 0 | 0,519 |
| E | | 0 | 1 | 0,039 | 0,002 | 0 | 1 | 0,039 |
| EB | | 0 | 0 | 0,442 | 0,497 | 0 | 0 | 0,442 |
| DEB | | 0 | 0 | $2,04\ 10^{-5}$ | $2,32\ 10^{-5}$ | 0 | 0 | $2,04\ 10^{-5}$ |

La « conversion » du réactif (B ou E) est définie comme :

$$X\,(B) = \frac{\text{Débit d'alimentation B (kmol/s) - Débit du produit B (kmol/s)}}{\text{Débit d'alimentation B (kmol/s)}} \qquad \text{(III.7)}$$

$$X\,(E) = \frac{\text{Débit d'alimentation E (kmol/s) - Débit du produit E (kmol/s)}}{\text{Débit d'alimentation E (kmol/s)}} \qquad \text{(III.8)}$$

Il existe plusieurs façons de définir le « rendement » du produit EB souhaité, comme indiqué dans l'équation. (III.9).

$$Y\,(EB/B) = \frac{\text{Débit du produit EB (kmol/s)}}{\text{Débit d'alimentation B (kmol/s)}} \qquad \text{(III.9)}$$

$$Y\,(EB/E) = \frac{\text{Débit du produit EB (kmol/s)}}{\text{Débit d'alimentation E (kmol/s)}} \qquad \text{(III.10)}$$

**Tableau III-16**: Comparaison entre la température du réacteur et la conversion et le rendement.

| T(K) | X( B) | X( E ) | Y(EB/B) | Y(EB/E) |
|---|---|---|---|---|
| 410 | 0,46 | 0,92 | 0,46 | 0,92 |
| 420 | 0,475 | 0,95 | 0,475 | 0,95 |
| 430 | 0,4825 | 0,965 | 0,4825 | 0,965 |
| 440 | 0,4875 | 0,975 | 0,4875 | 0,975 |
| 450 | 0,4925 | 0,985 | 0,4925 | 0,985 |
| 460 | 0,495 | 0,99 | 0,495 | 0,99 |
| 470 | 0,495 | 0,99 | 0,495 | 0,99 |
| 480 | 0,4975 | 0,995 | 0,4975 | 0,995 |

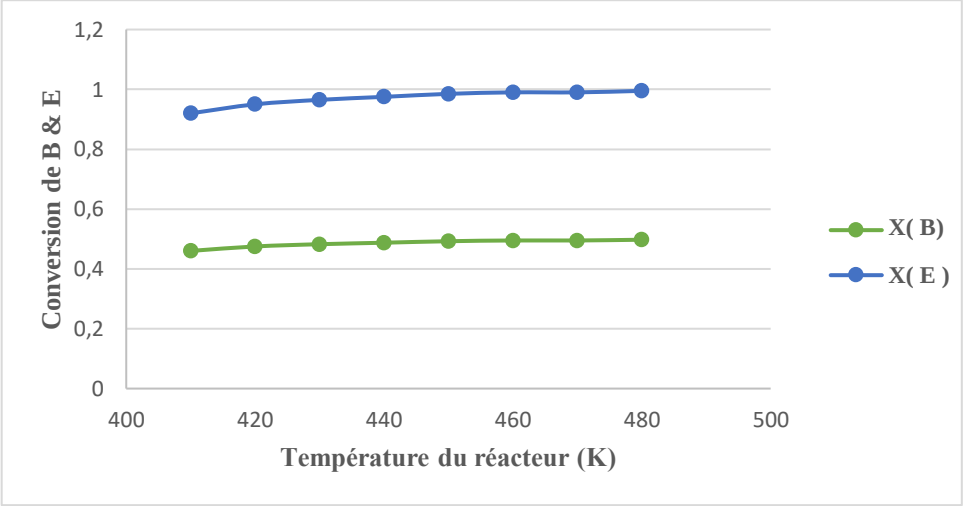



**Figure III-42**: Tracé entre la température du réacteur et la conversion de B & E.

**Tableau III-17**: Comparaison entre le volume du réacteur et la conversion et le rendement.

| Volume de Réacteur ($m^3$) | X( B) | X( E ) | Y(EB/B) | Y(EB/E) |
|---|---|---|---|---|
| 60 | 0,4725 | 0,945 | 0,4725 | 0,945 |
| 80 | 0,4775 | 0,955 | 0,4775 | 0,955 |
| 100 | 0,4825 | 0,965 | 0,4825 | 0,965 |
| 120 | 0,4850 | 0,970 | 0,4850 | 0,970 |
| 140 | 0,4875 | 0,975 | 0,4875 | 0,975 |

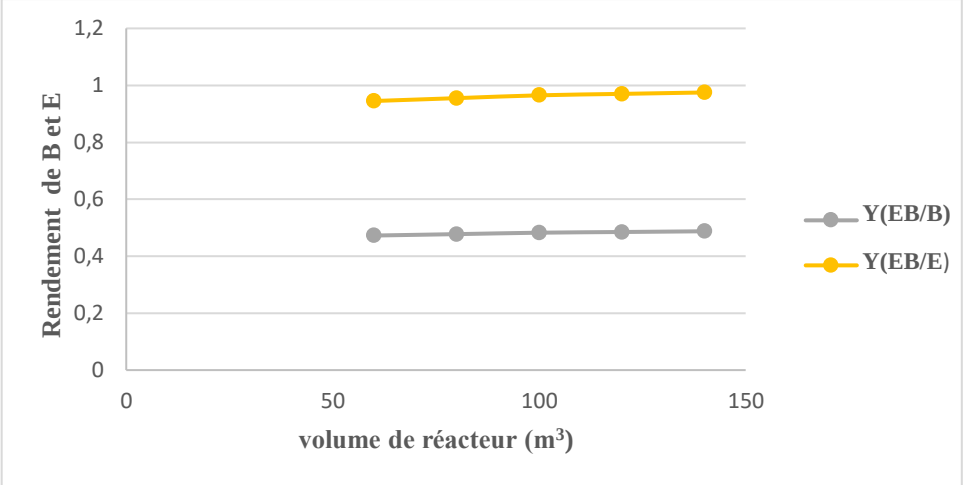



**Figure III-43**: Tracé entre le volume du réacteur et le rendement de B & E.

**Tableau III-18:** Comparaison entre le débit d'alimentation vs la conversion et le rendement.

| Débit d'alimentation de benzène (kmol/s) | X( B) | X( E ) | Y(EB/B) | Y(EB/E) |
|---|---|---|---|---|
| 0,100 | 0,984 | 0,494 | 0,981 | 0,490 |
| 0,200 | 0,893 | 0,893 | 0,893 | 0,893 |
| 0,300 | 0,639 | 0,959 | 0,639 | 0,959 |
| 0,400 | 0,483 | 0,965 | 0,483 | 0,965 |
| 0,500 | 0,386 | 0,966 | 0,386 | 0,966 |
| 0,600 | 0,321 | 0,964 | 0,321 | 0,964 |

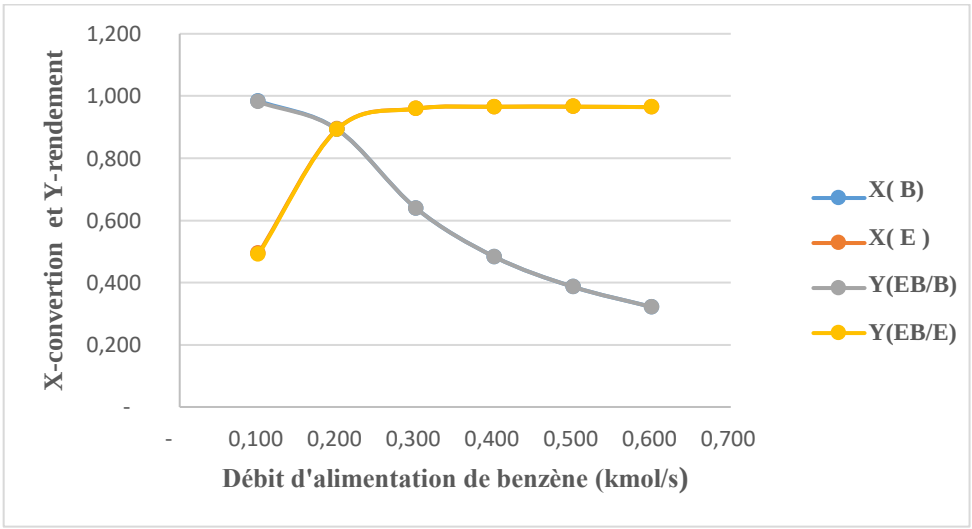



**Figure III-44:** Tracé entre le débit d'alimentation en fonction de la conversion et du rendement.

**Inférences:**

En analysant soigneusement le tableau et les graphes ci-dessus, nous aurons les conclusions suivantes.

À la température optimale du réacteur (T = 430 K), le volume du réacteur (V = 100 $m^3$) et le débit d'alimentation (kmol / s) (F (B) = 0,4, F (E) = 0,2) la réaction à une conversion et un rendement maximum.

Les valeurs de conversion et de rendement pour les réacteurs à cuve unique sont :

Conversion de benzène X (B) = 48,25%

Conversion d'éthylène X (E) = 96,5%

Rendement d'éthylbenzène Y (EB / B) = 48,25%

Rendement d'éthylbenzène Y (EB / E) = 96,5%

Les valeurs de conversion et de rendement du réacteur série CSTR sont :

Conversion de benzène X (B) = 49,75%

Conversion d'éthylène X (E) = 99,5%

Rendement d'éthylbenzène Y (EB / B) = 49,75%

Rendement d'éthylbenzène Y (EB / E) = 99,5%

**Discussion**

Pour le réacteur à cuve unique à la température optimale du réacteur T = 430 (k), le volume du réacteur V = 100 ($m^3$). Et le débit d'alimentation, c'est-à-dire le benzène F (B) = 0,4 et l'éthylène F (E) 0,2 kmol / s, la conversion du benzène et de l'éthylène était de 48,25% et 96,5%. Le rendement en éthylbenzène Y (EB / B) et Y (EB / E) s'est avéré être de 48,25% et 96,5%.

En remplaçant le réacteur unique par des réacteurs en série dont la somme des volumes est égale au volume du réacteur unique, les performances de la réaction peuvent être améliorées.

Pour la série CSTR dans les mêmes conditions de réaction, à savoir la température et le débit d'alimentation, la conversion du benzène et de l'éthylène s'est avérée être de 48,5% et 99,5%. Le rendement en éthylbenzène Y (EB / B) et Y (EB / E) était de 49,75% et 99,5%.

## III.6 Aspen HYSYS Simulation dans un CSTR

### III.6.1 Configuration de la simulation

Nous cliquons sur démarrer et sélectionnons les programmes, Aspen Tech, Aspen Hysys V 11 La figure III.45 illustre l`interface du programme Aspen HYSYS.

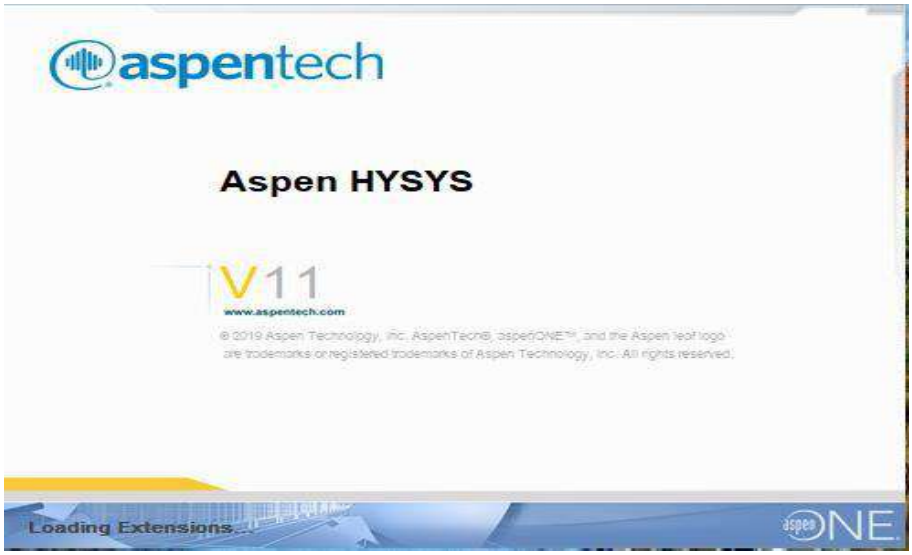



**Figure III-45** : Démarrage d'Aspen HYSYS

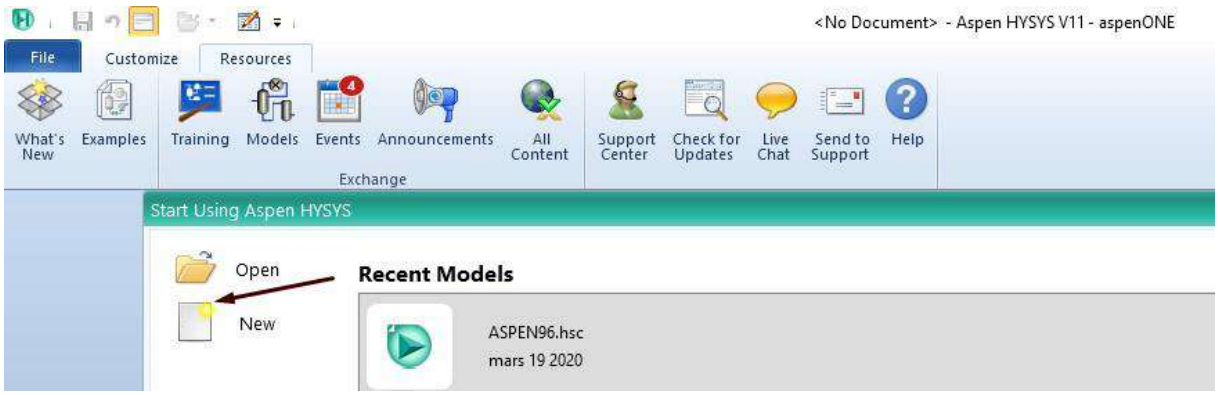



**Figure III-46**: New Simulation Open Aspen HYSYS

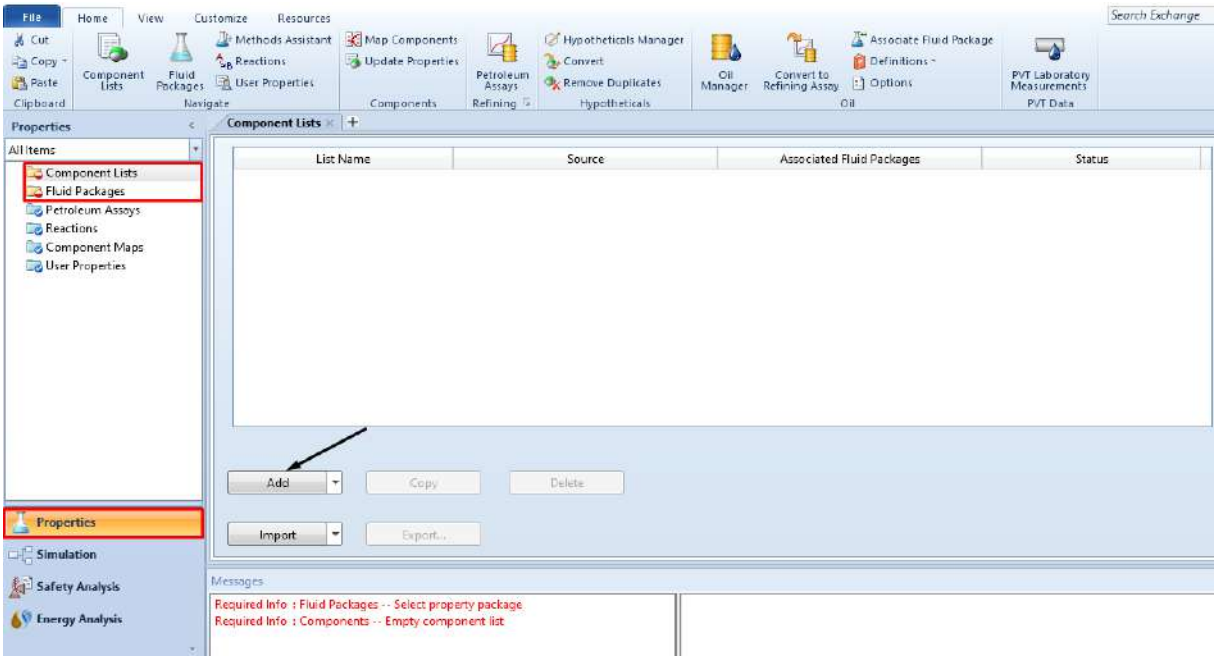



**Figure III-47** : Fenêtre Aspen HYSYS avec feuille de flux.

Les composants chimiques qui seront utilisés dans la simulation sont déterminés en cliquant *Components list.* La fenêtre illustrée à la figure III.48 s'ouvre. Nous écrivons le nom du composant ou la formule. Par exemple, si vous avez écrit « benzène », la boîte sous la figure III.48 s'ouvre. Cliquez sur " BENZENE " et cliquez sur *Add.* Répétez la procédure pour "ETHYLENE" et " ETHYLBENZENE ". M-DEB a été choisi sur trois isomères DEB possibles (ortho, méta et para), choisis pour représenter le DEB, et s'est avéré être l'isomère DEB le plus persistant.

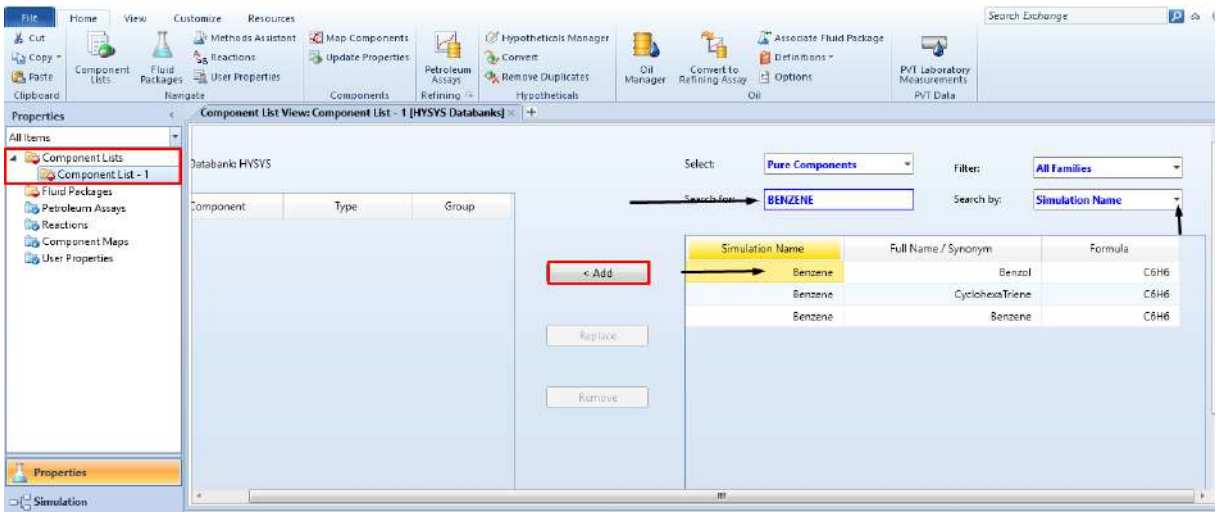



**Figure III-48:** Sélection du composant benzène.

Les noms de composants dans la case *Component* de composants peuvent être modifiés en quelque chose de plus pratique en surlignant. La liste des composants renommés apparaît au bas de la figure III.49.

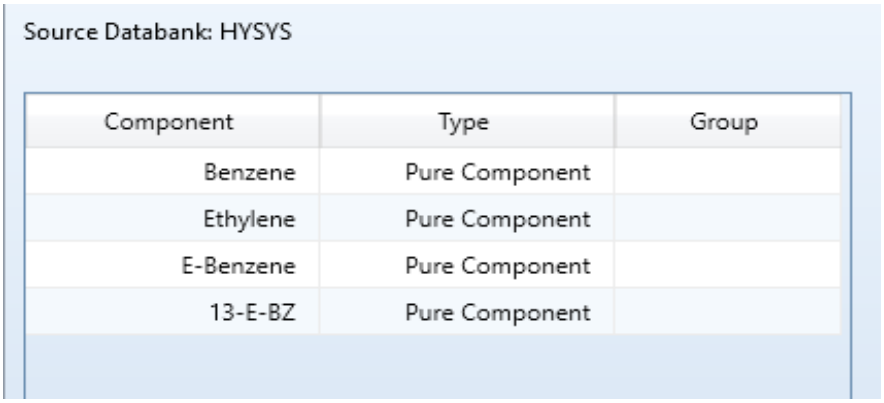



**Figure III-49 :** Le benzène, l'éthylène et l'éthylbenzène, le diéthylbenzène sont ajoutés comme composants.

Le package de propriétés physiques à utiliser doit être spécifié. *Chao–Seader* concéder comme le meilleur fonctionne pour ce type de système d'hydrocarbures. Cliquez sur *Fluid packages* et *basis-1*. L`utilisation de la flèche déroulante dans *property package selection* pour sélectionner « *Chao Seader* » comme indiqué sur les Figure III.50 et III.51.

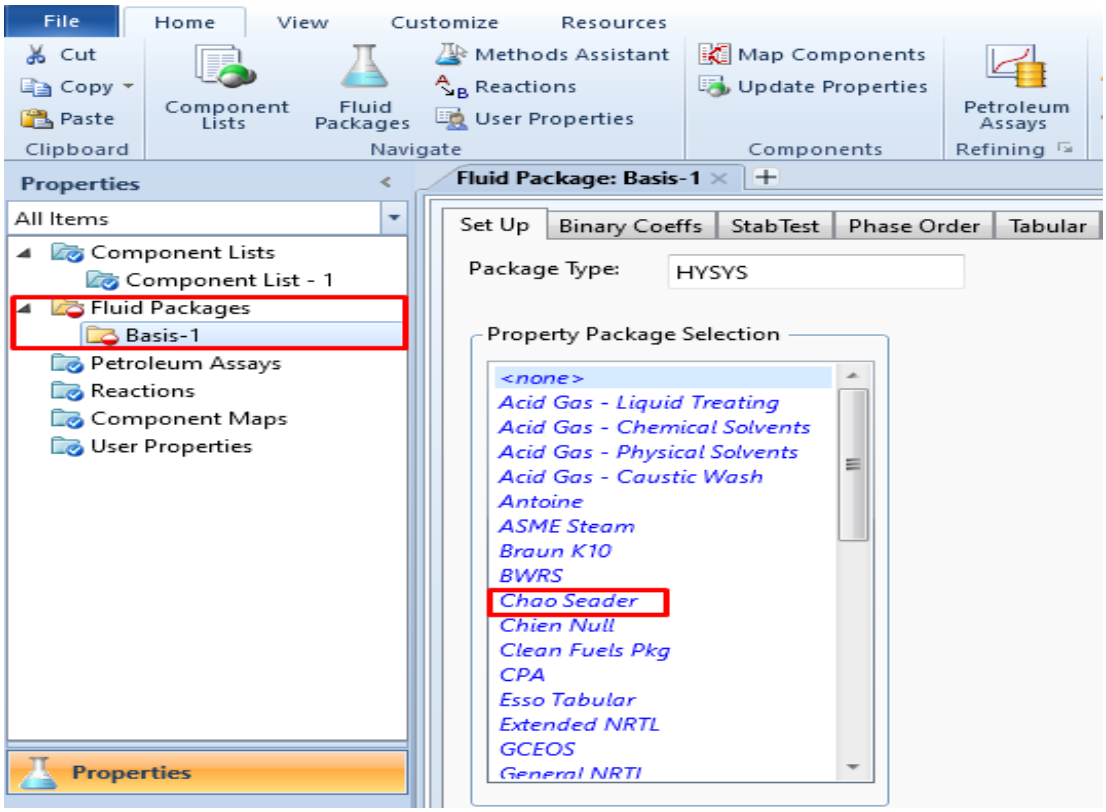



**Figure III-50** : Méthode de sélection des propriétés physiques.

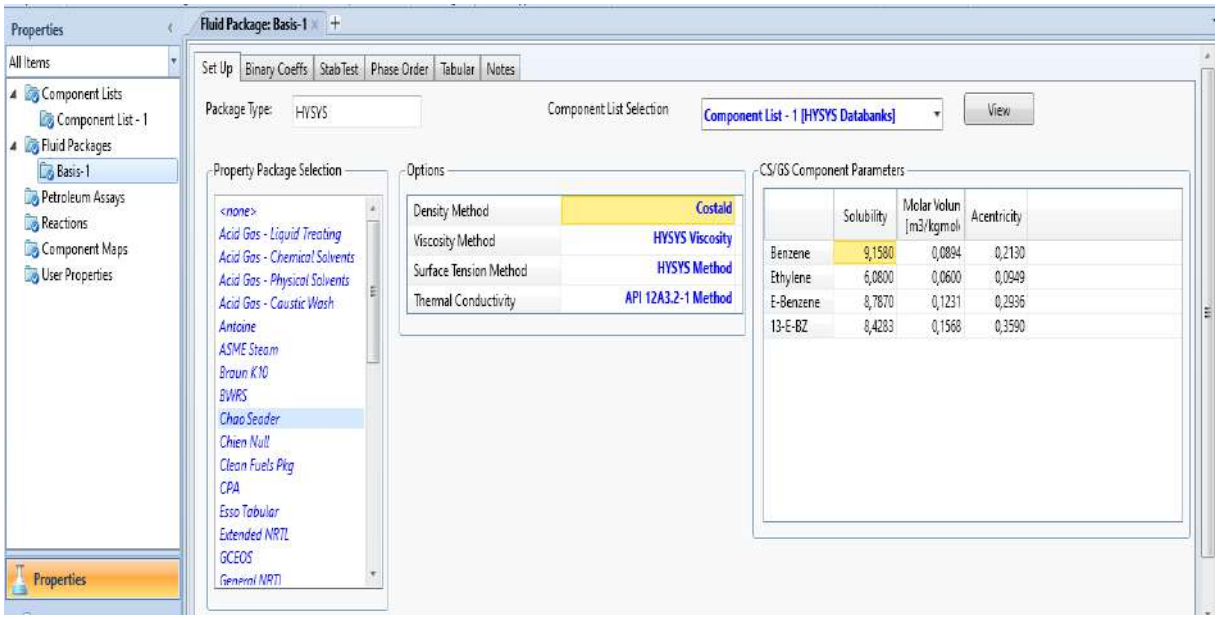



**Figure III-51 :** Méthode Chao Seader choisie.

À l'aide d'Aspen HYSYS, sélectionnez le formulaire : simulez "Chemicals with Metric Units", nous modifions les unités en «SI ». Comme le montre la figure III.52.

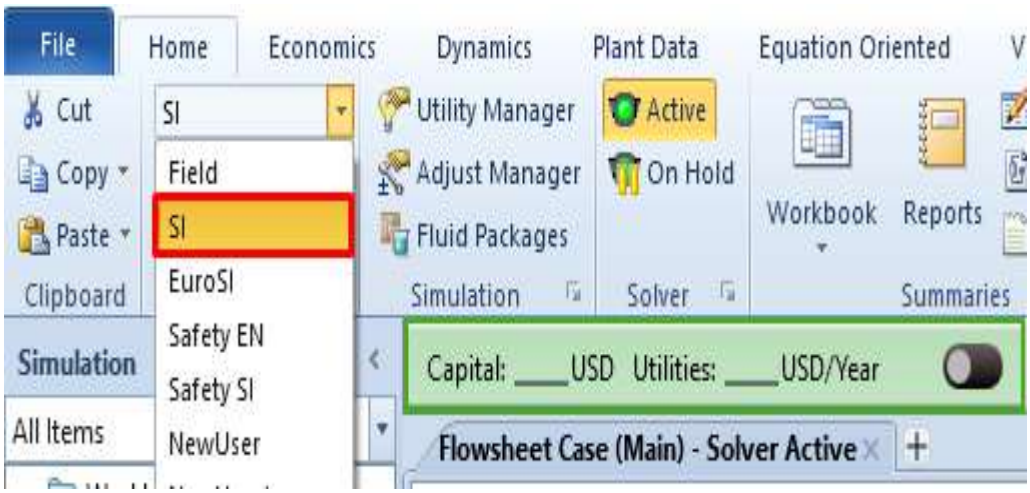



**Figure III-52** : Spécification des unités.

Au bas de la fenêtre se trouvent des onglets de la page pour les différentes unités et les opérations. Vous cliquez sur l'onglet de la page *Reactor* pour l`affichage des types des réacteurs alternatifs (Figure III.53).

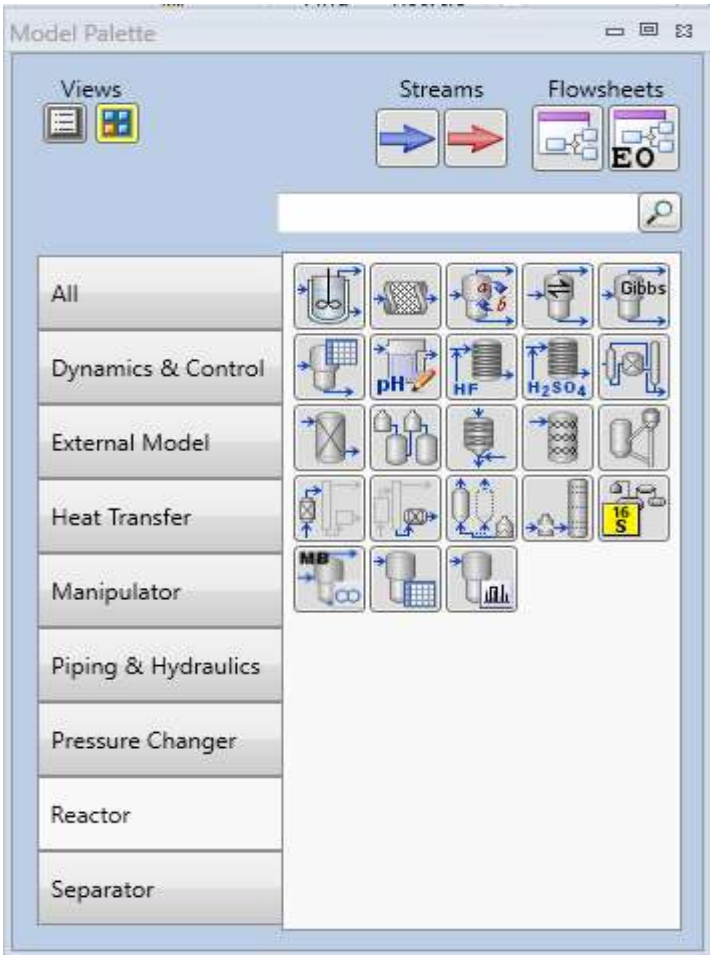



**Figure III-53** : Types des réacteurs.

Nous cliquons sur la flèche à droite du type *RCSTR*, ensuit, nous définissons l'un des symboles et nous déplaçons le pointeur sur la feuille de flux vierge. Cliquez sur inserts du schéma de flux CSTR (Figure III.54). De nombreux CSTR peuvent être installés en continuant à cliquer sur le schéma de fonctionnement.

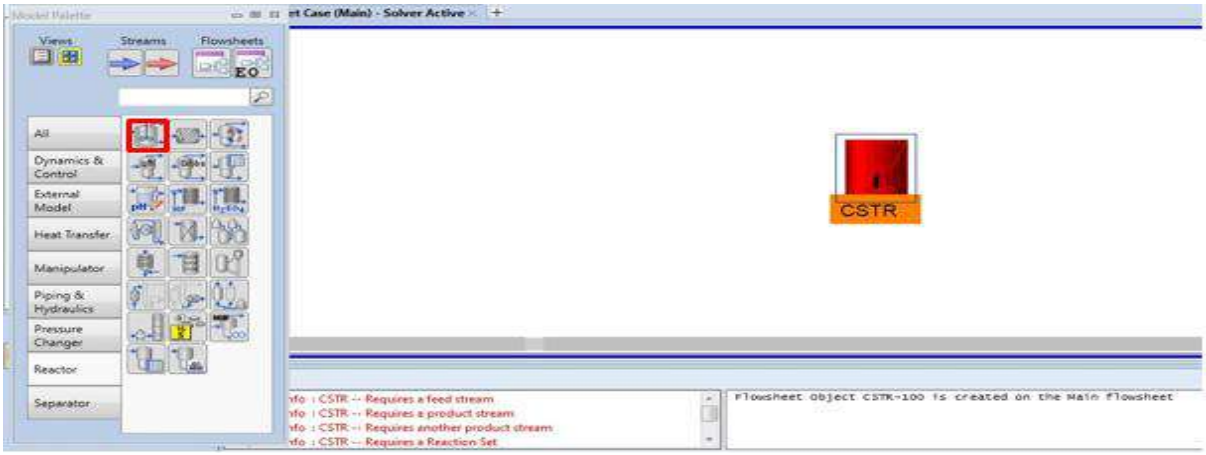



**Figure III-54** : Placer RCSTR sur le schéma.

Nous devons maintenant installer des gammes d'alimentation et de produits avec des vannes et une pompe. Vous cliquez sur l'onglet de la page *Pressure Changers* qui fournit des compresseurs, vannes et autres composants (figure III.55).

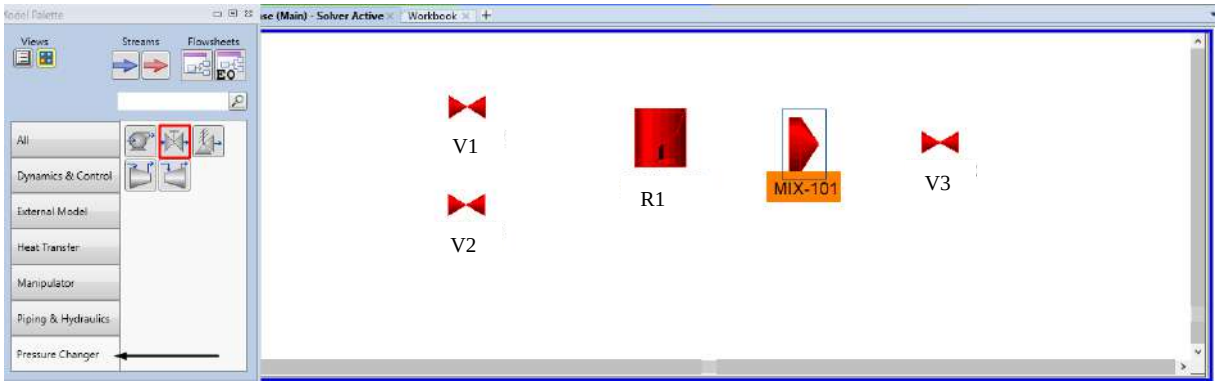



**Figure III-55 :** Installation mixeur et des vannes.

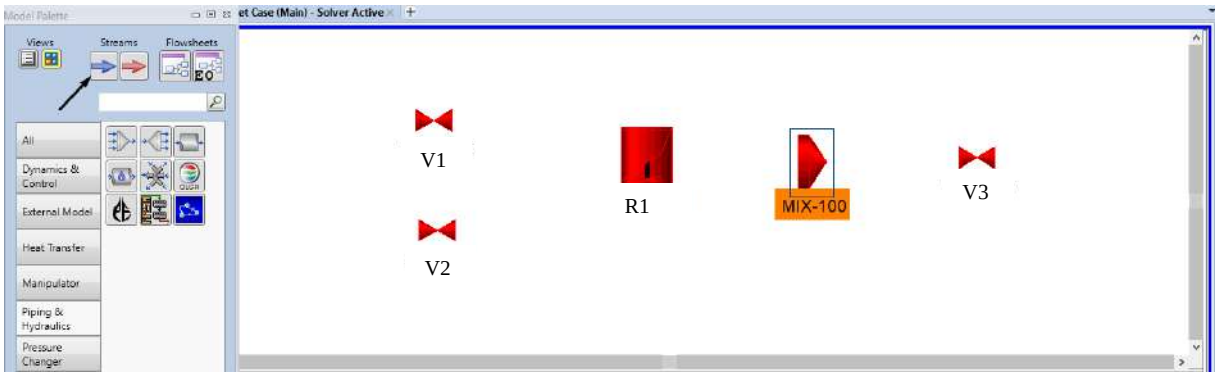



**Figure III-56** : Feuille de calcul avec équipement installé.

Pour installer des flux pour le matériau, les produits et les connexions intermédiaires, cliquez sur la flèche de la zone *Material Streams* en bas à gauche de la fenêtre et sélectionnez *Streams.* Déplacer le curseur sur le schéma produit un certain nombre de flèches sur les entrées et les sorties des différents blocs. Un flux est installé en cliquant d'abord sur le schéma, puis en cliquant sur la flèche pointant vers une vanne d'alimentation. La figure III.57 montre le flux «1» connecté à vanne «V1».

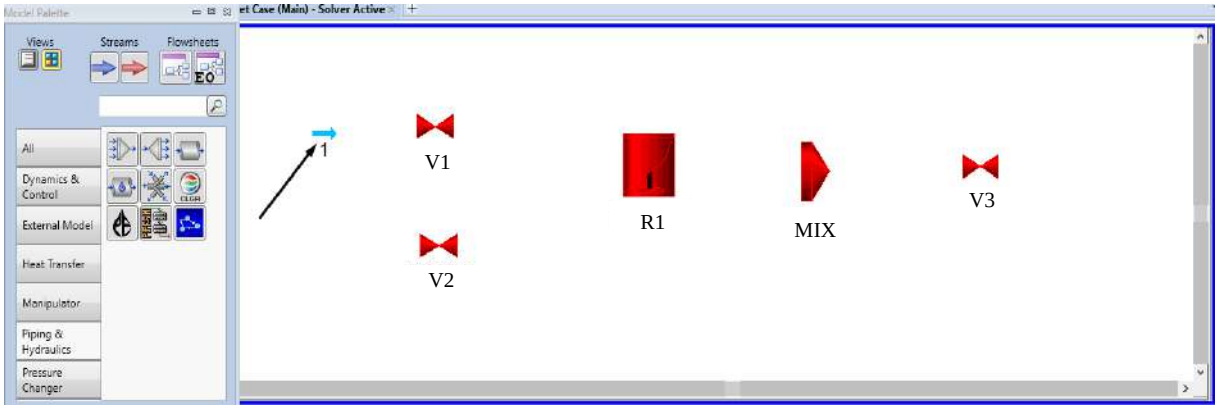



**Figure III-57** : Installation du flux de matériaux.

La figure III.58 montre les propriétés du courant d'entrée de l'éthylène en phase gazeux.

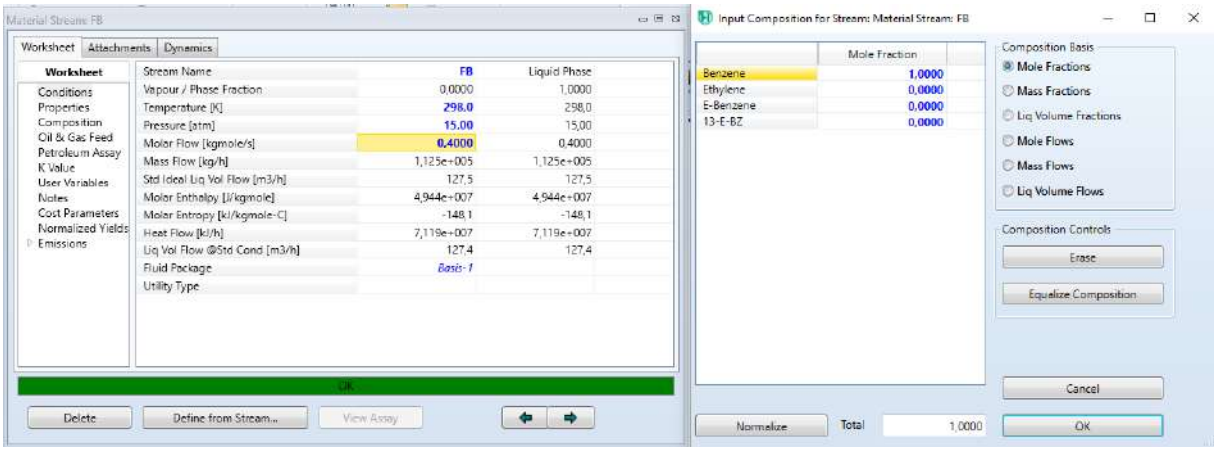



**Figure III-58 :** Propriétés du flux d'admission de benzène gazeux en termes de T, P et de débit de composition.

La figure III.59 montre les propriétés du flux d'entrée de benzène en phase liquide.

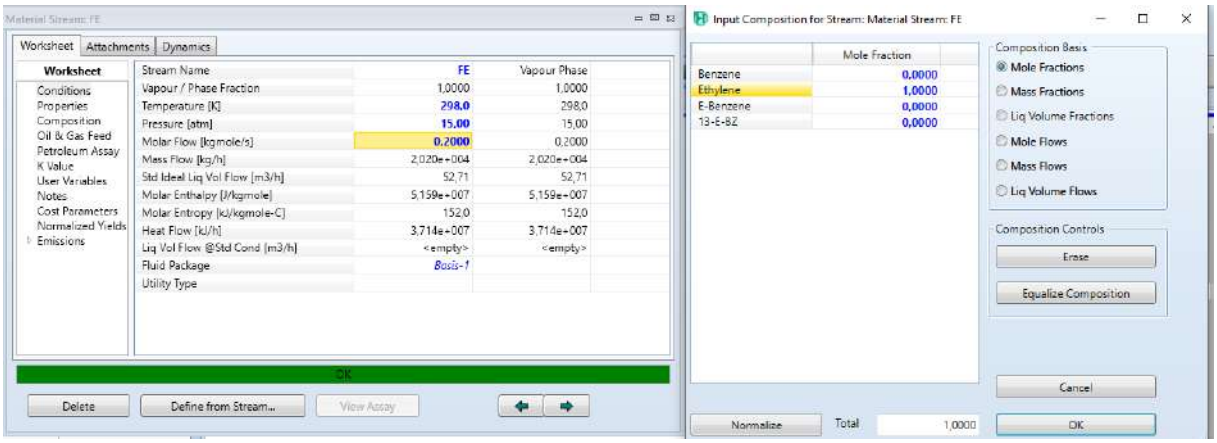



**Figure III-59 :** Propriétés du flux d'admission d'éthylène liquide en termes de T, P et de débit de composition.

La figure III.60, III.61sont montrer les spécifications d'entrée « VALVE1 ». Les spécifications d'entrée « VALVE2 » sont identiques « VALVE3 ».

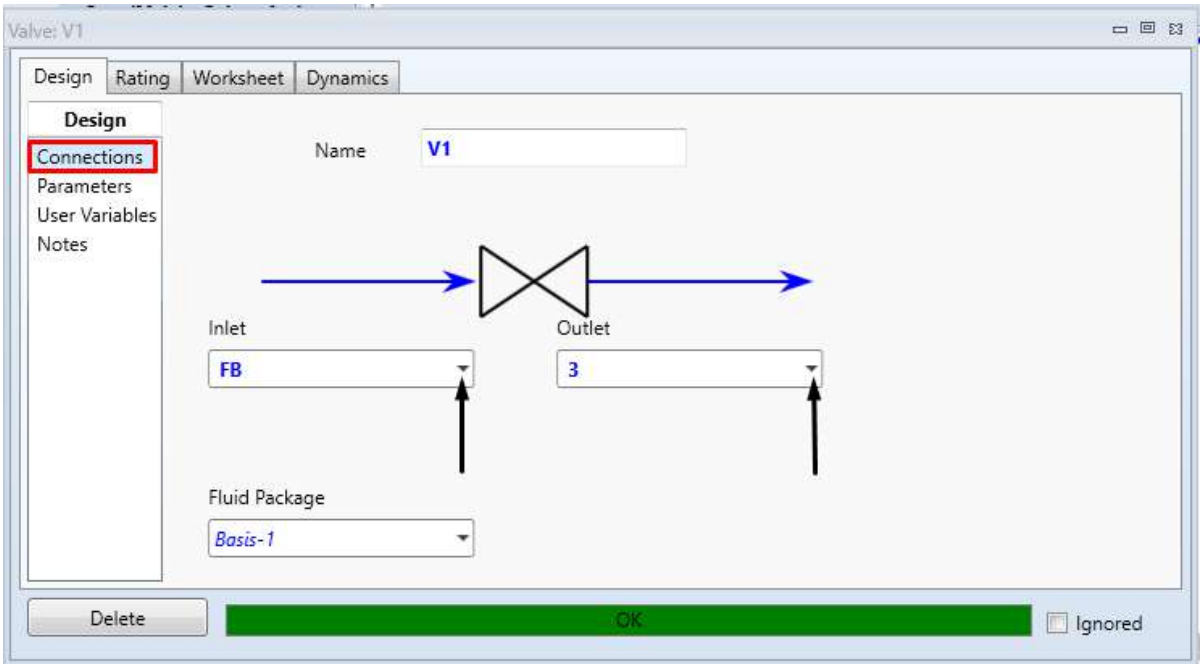



**Figure III-60**: Spécifications d'entrée et de sortie « VALVE1 », « VALVE2 » et « VALVE3 ».

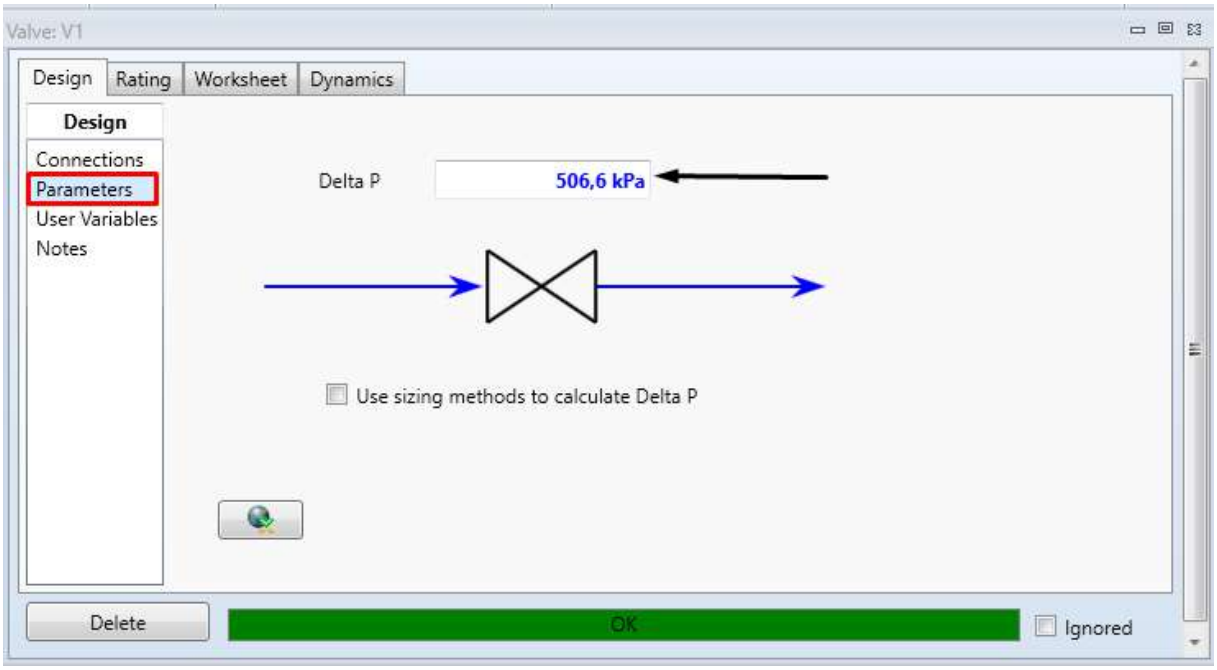



**Figure III-61** : Spécifications d'entrée « VALVE1 » et « VALVE2 », « VALVE3», où la chute de pression est réglée à 5 atm de sorte que la pression de sortie soit égale à celle du réacteur.

## III.6.2 Spécification des réactions

Cliquez sur *Reactions* dans la colonne à gauche de la fenêtre du *Properties*, puis cliquez à nouveau sur *Reactions*, la figure III.62. Pour configurer une nouvelle réaction, cliquez sur *Add Reaction.*

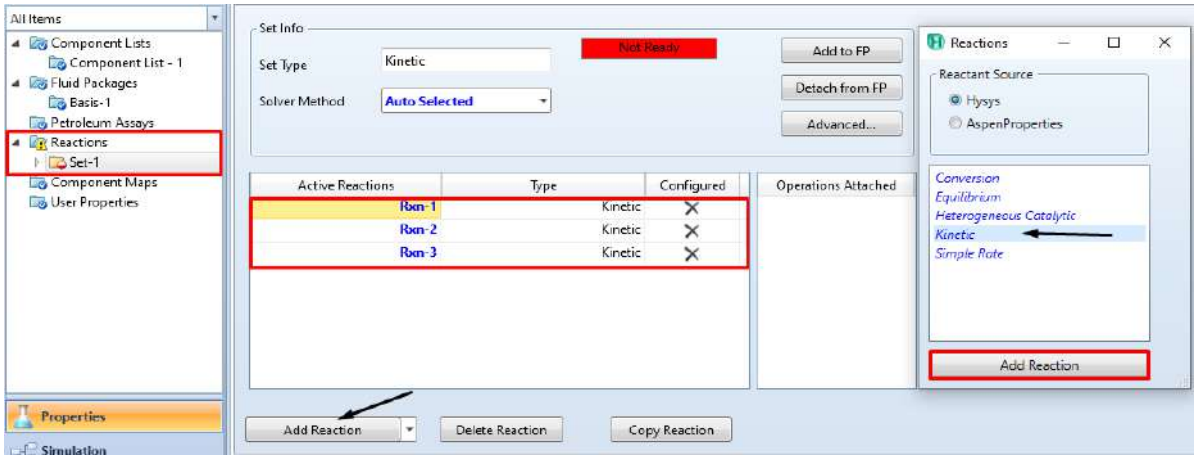



**Figure III-62** : Configuration des réactions avec type de réaction.

Cliquez sur la case *Stoichiometry and Rate Info.*, *Components* et utilisez le menu déroulant pour sélectionner le composant (Benzène). Réglez le coefficient stœchiométrique sur « -1 » (le réactif est consommé) et *Stoich coeff* sur «1» (réaction du premier ordre) (voir Fig. III.63). Répétez l'opération pour l'autre réactif (Ethylène). De la même manière, définissez-le produit comme E-Benzène avec un coefficient de 1 (produit dans la réaction). Ensuit fermer la fenêtre.

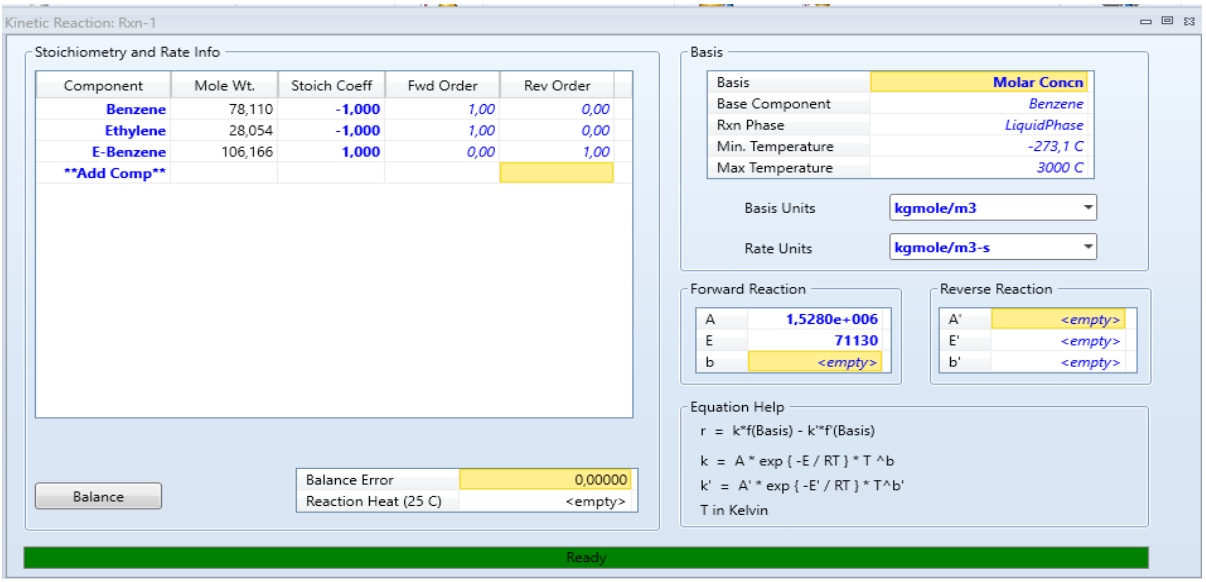



**Figure III-63**: Spécification des réactifs et des produits pour la première réaction.

Les deux autres réactions sont configurées de la même manière que la précédente (voir Fig. III.64).

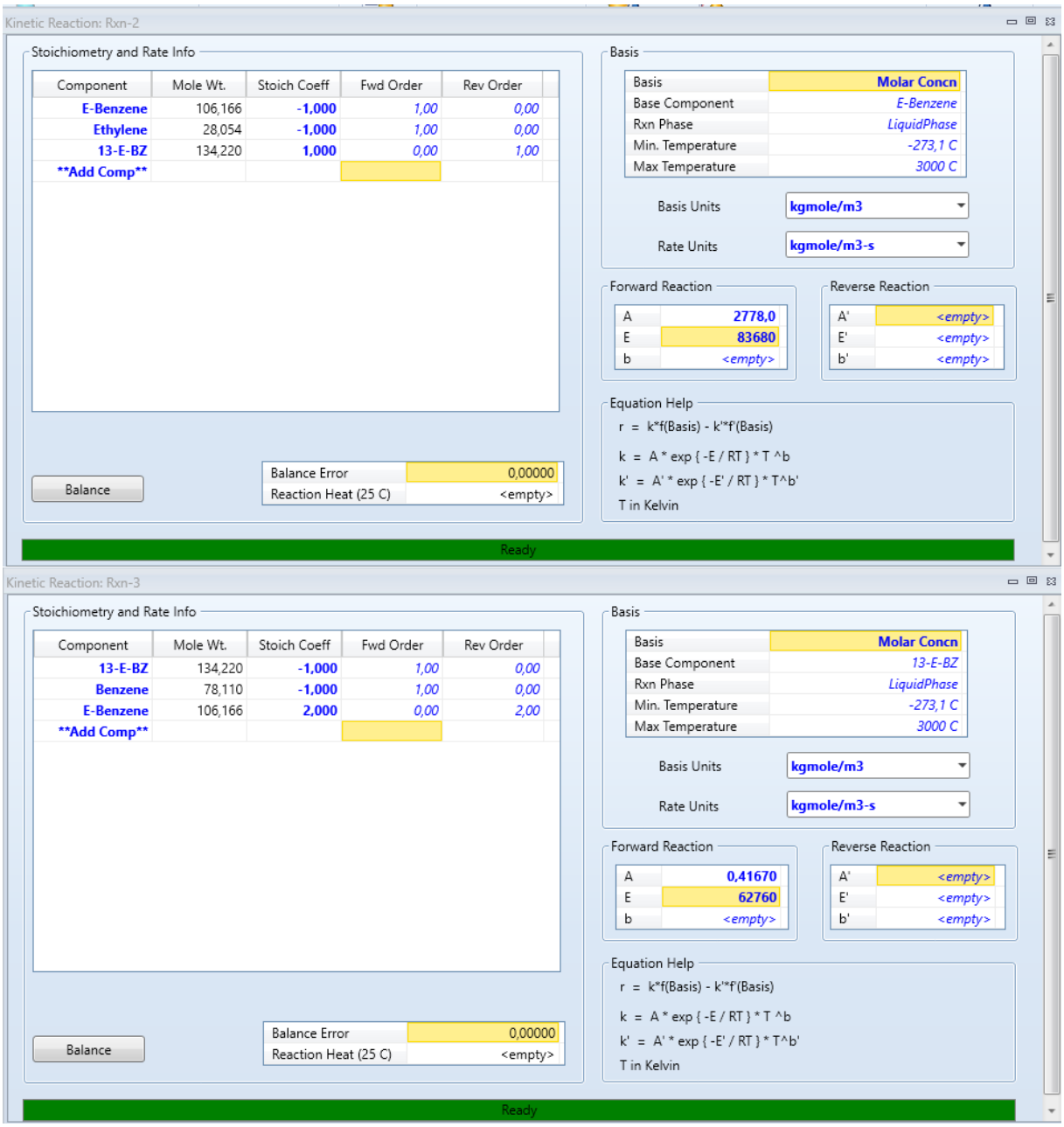



**Figure III-64**: Spécification des réactifs et des produits pour les deuxièmes et troisièmes réactions.

## III.6.3 Configuration du réacteur

Cliquez sur le bloc réacteur. La fenêtre illustrée à la figure III.63 s'ouvre sur laquelle la température et la pression de fonctionnement sont réglées, ainsi que le volume du réacteur.

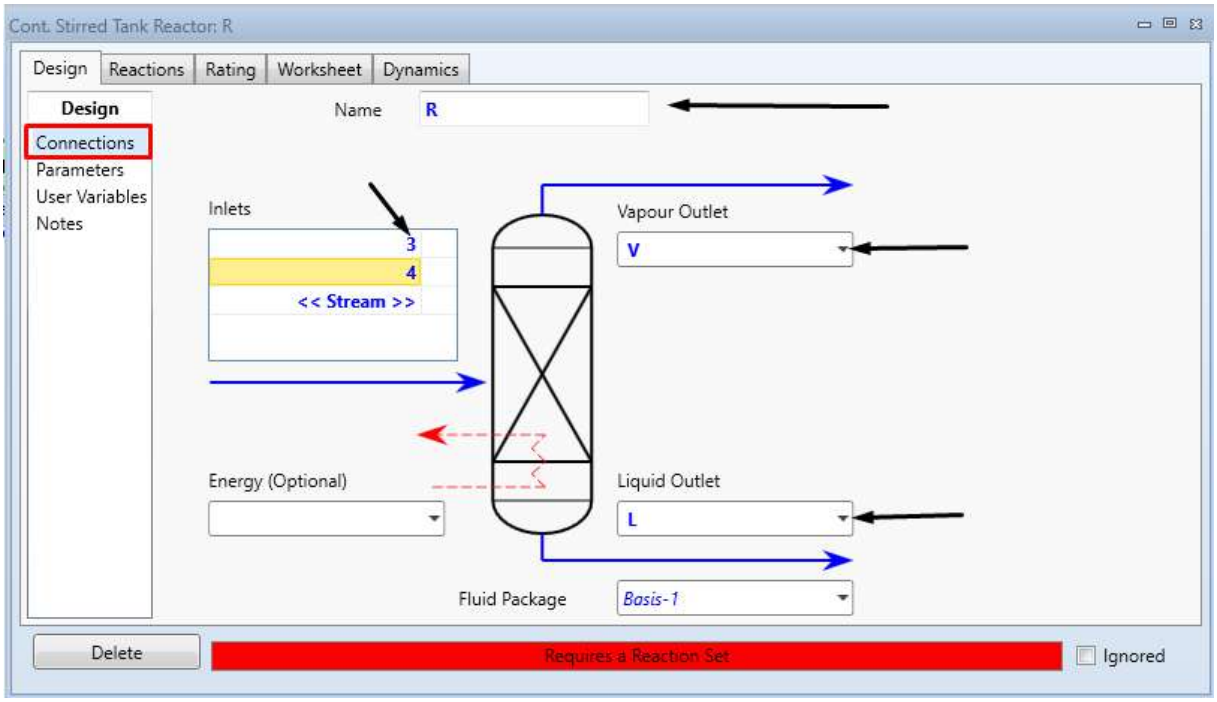



**Figure III-65**: Spécification des courants d'entrée et de sortie du réacteur.

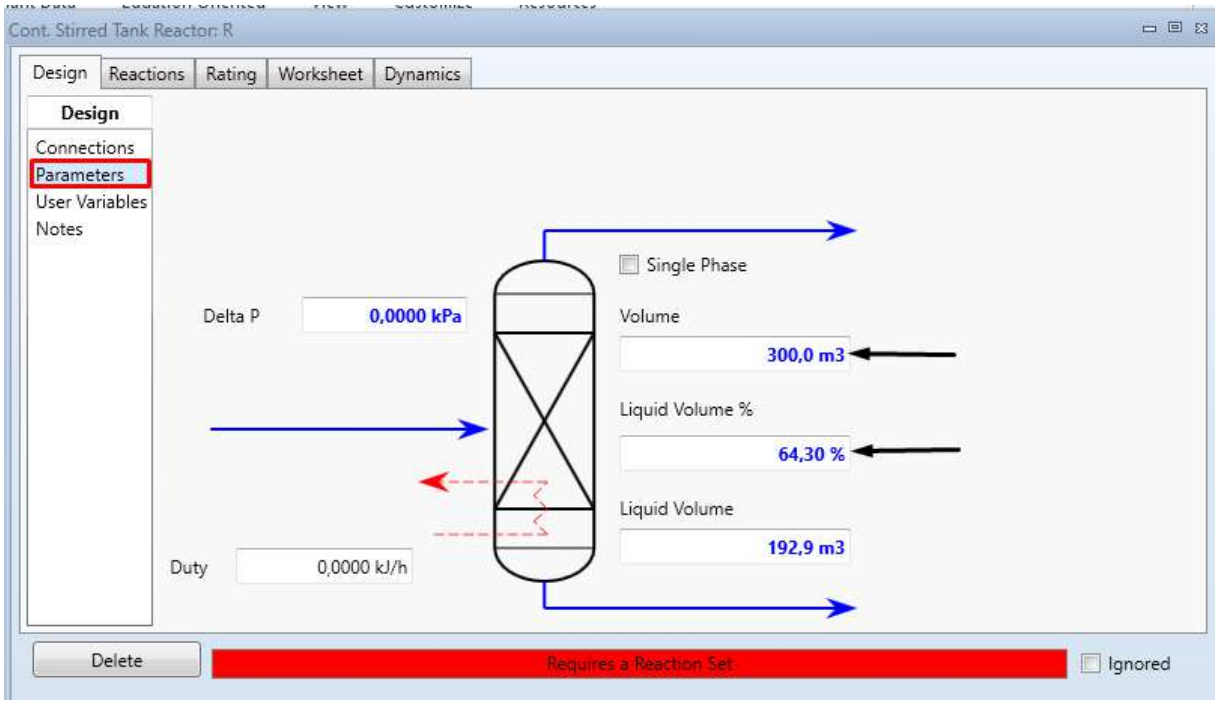



**Figure III-66** : Configuration des conditions et de la taille du réacteur.

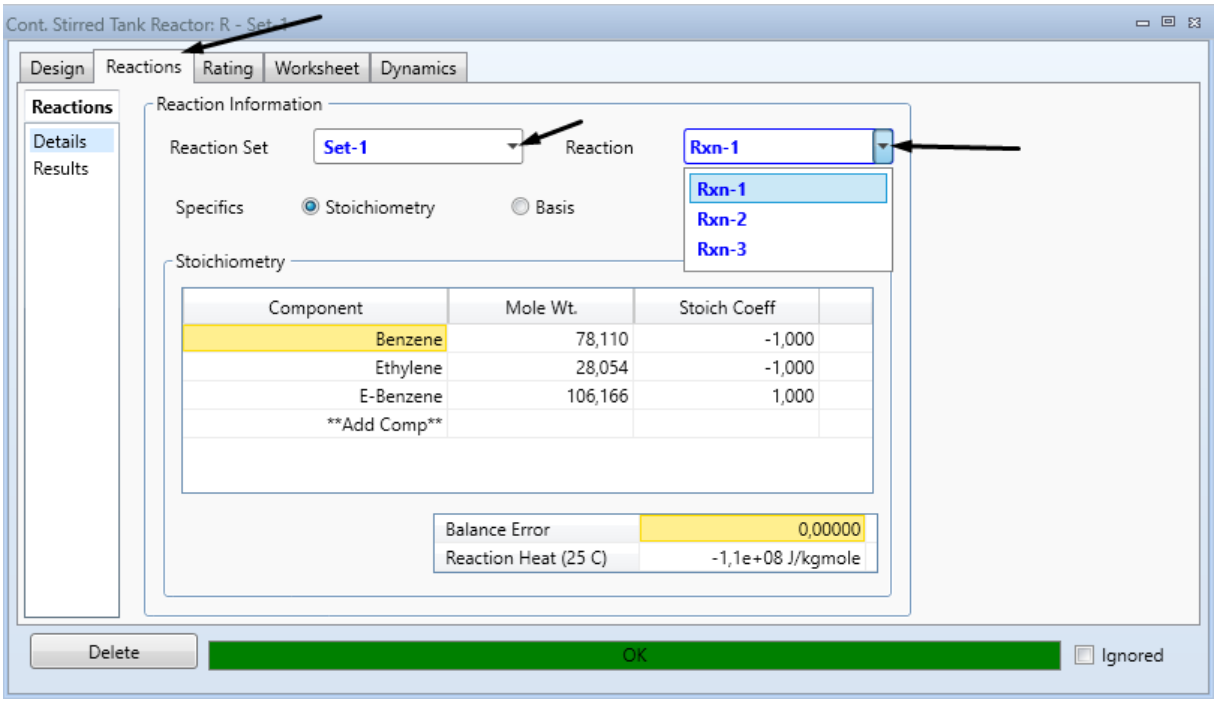



**Figure III-67** : Spécification des paramètres cinétiques pour les trois réactions dans le réacteur.

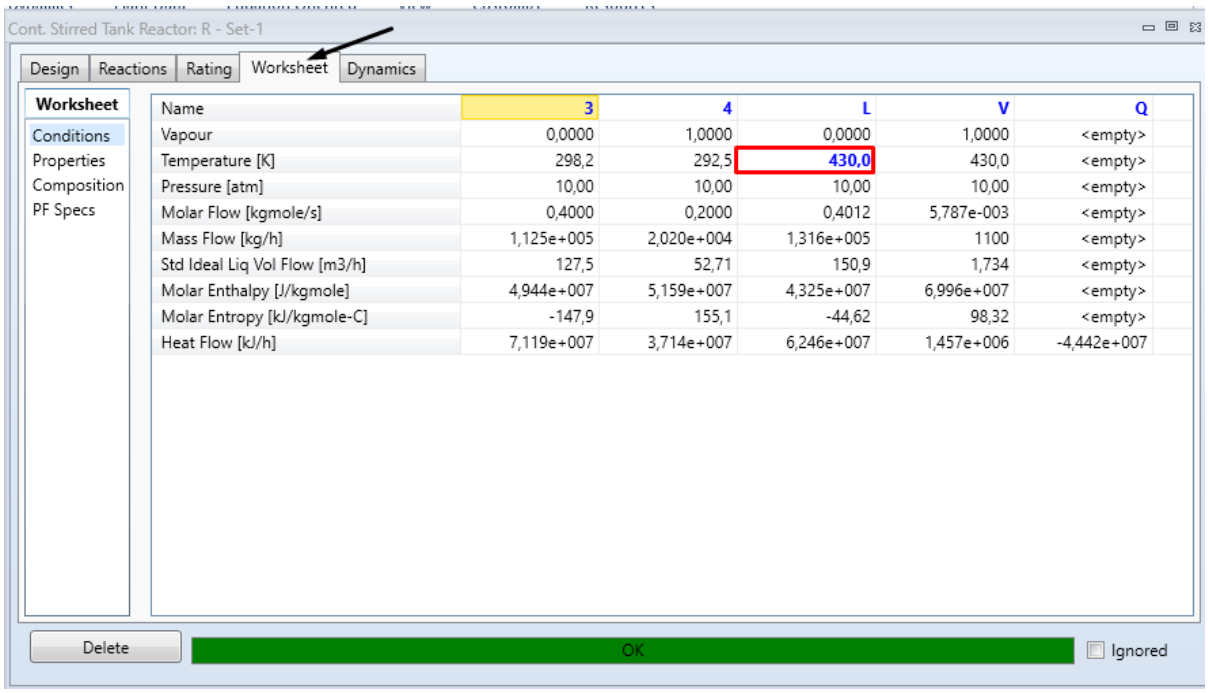



**Figure III-68** : Spécification de température de réacteur.

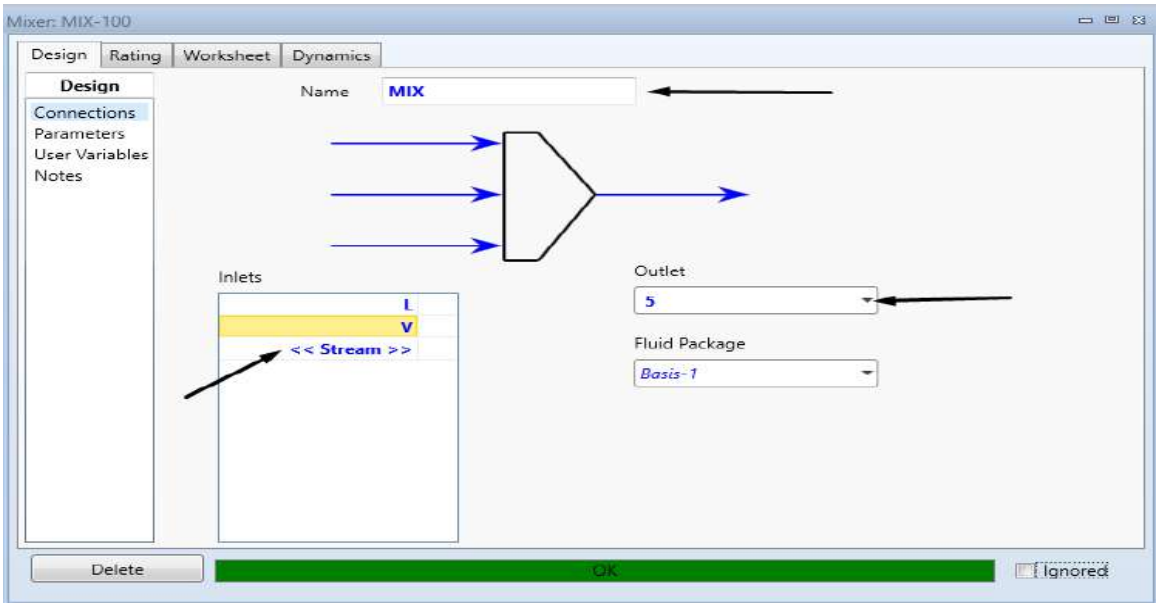



**Figure III-69** : Spécification de Mixer pour obtenir les résultats finals.

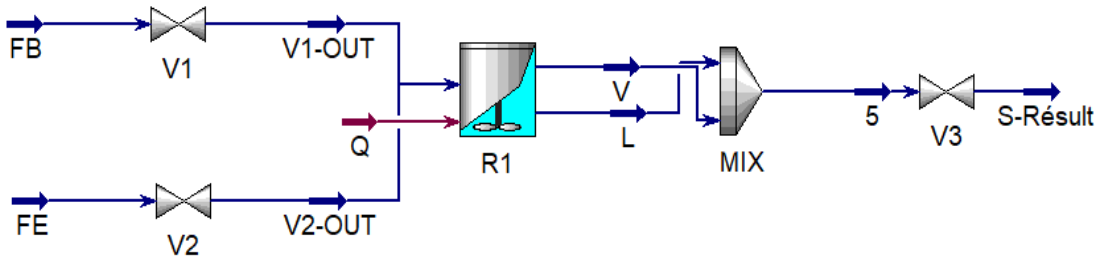



**Figure III-70** : Diagramme final.

Les flux d'entrée et de sortie du réacteur peuvent être vérifiés en cliquant sur *Stream Results*, comme le montre sur la figure III.71.

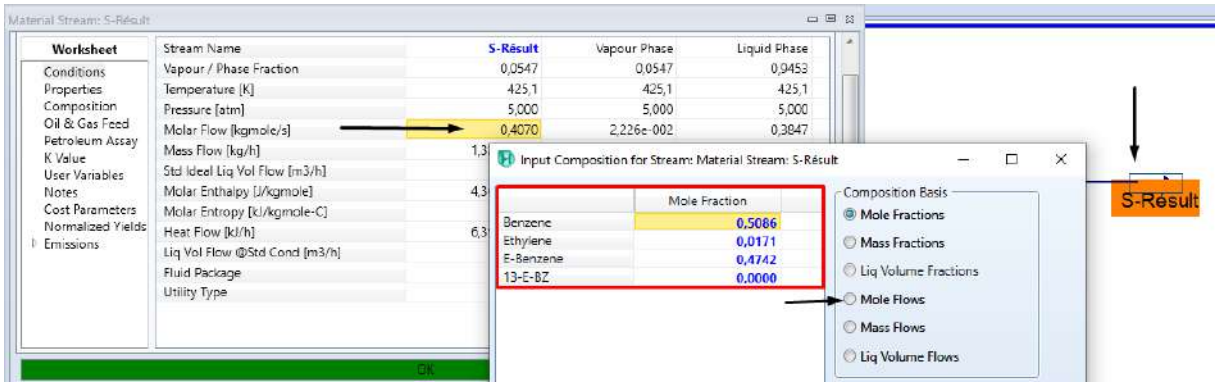



**Figure III-71** : Résultats de flux.

## III.6.4 Résultats et discussion

## A. Optimisation du débit d'alimentation

Nous faisons d'abord l'optimisation du flux d'alimentation, pour cela nous devons fixer d'autres quantités comme la réaction, température et volume du réacteur. A partir de la revue de la littérature, nous avons une bonne idée sur le réacteur, température et du volume du réacteur qui peuvent être ou non des valeurs optimales.

Prenons le débit d'alimentation de l'éthylène F (E) = 0,2 kmol/s, température du réacteur T (K) = 430 K et le volume du réacteur V = 300 $m^3$ et pourcentage volume de liquide 60,30 %.

En faisant varier le débit de benzène F (B) = 0,1, 0,2, 0,3, 0,4, 0,5 et 0,6 (kmol / s), exécutez la simulation et les résultats de flux obtenus ont été tabulés comme suit.

**Tableau III-19 :** Comparaison entre le débit d'alimentation et le débit de produits.

| Débit d'alimentation (kmol /s) | | Débit de produits (kmol /s) | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| Benzène | Éthylène | Benzène | Éthylène | Éthylbenzène | Diéthylbenzène |
| 0,1 | 0,2 | 0,03 | 0,127 | 0,07 | $1,88\ 10^{-5}$ |
| 0,2 | 0,2 | 0,074 | 0,074 | 0,126 | $1,49\ 10^{-5}$ |
| 0,3 | 0,2 | 0,134 | 0,034 | 0,166 | $1,20\ 10^{-5}$ |
| 0,4 | 0,2 | 0,207 | 0,007 | 0,193 | $9,83\ 10^{-6}$ |
| 0,5 | 0,2 | 0.304 | 0,004 | 0,196 | $6.89\ 10^{-6}$ |
| 0,6 | 0,2 | 0,404 | 0,004 | 0,196 | $5,17\ 10^{-6}$ |

**Tableau III-20 :** Comparaison entre le débit d'alimentation et la fraction molaire du produit.

| Débit d'alimentation (kmol /s) | | Fraction molaire du produit | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| Benzène | Éthylène | Benzène | Éthylène | Éthylbenzène | Diéthylbenzène |
| 0,1 | 0,2 | 0,125 | 0,563 | 0,312 | 0,0001 |
| 0,2 | 0,2 | 0,269 | 0,269 | 0,462 | $5,47\ 10^{-5}$ |
| 0,3 | 0,2 | 0,402 | 0,103 | 0,496 | $3,60\ 10^{-5}$ |
| 0,4 | 0,2 | 0,509 | 0,017 | 0,474 | $2,42\ 10^{-5}$ |
| 0,5 | 0,2 | 0,603 | 0,008 | 0,39 | $1,37\ 10^{-5}$ |
| 0,6 | 0,2 | 0,669 | 0,007 | 0,325 | $8,59\ 10^{-6}$ |

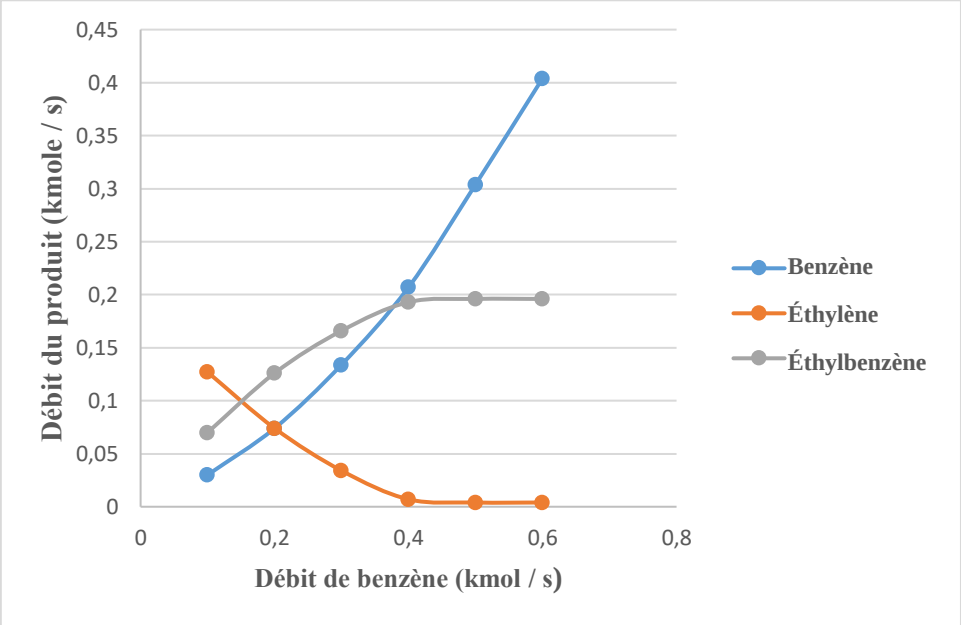



**Figure III-72:** Débit d'alimentation vs débit du produit.

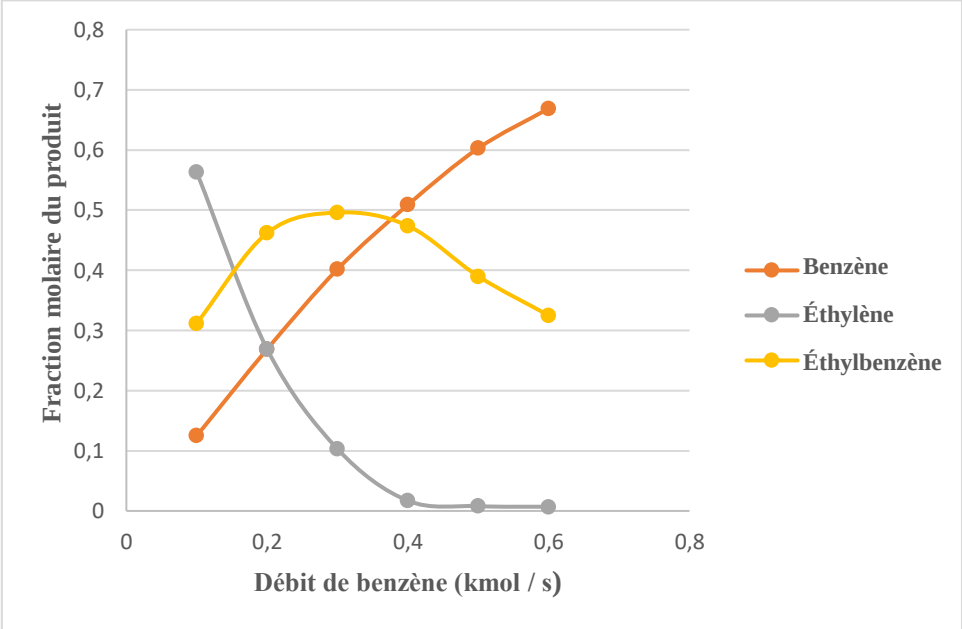



**Figure III-73 :** Débit d'alimentation vs fraction molaire du produit.

**Tableau III-21 :** Comparaison entre le débit de benzène avec la fraction molaire de di-éthylbenzène.

| Débit de Benzène(kmol/s) | Fraction molaire de Diéthylbenzène |
|---|---|
| 0,1 | 0,0001 |
| 0,2 | $5,47\ 10^{-5}$ |
| 0,3 | $3,60\ 10^{-5}$ |
| 0,4 | $2,42\ 10^{-5}$ |
| 0,5 | $1,37\ 10^{-5}$ |
| 0,6 | $8,59\ 10^{-6}$ |

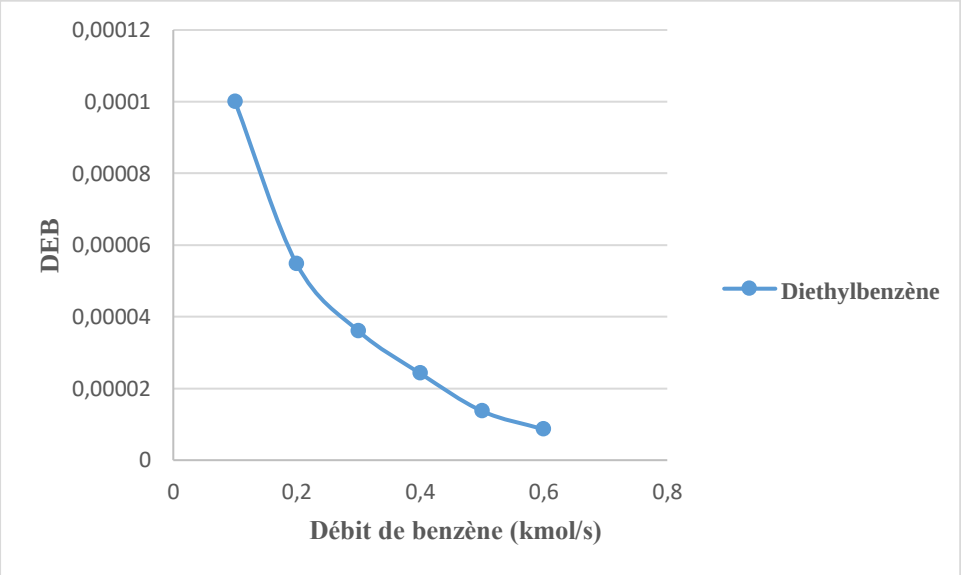



**Figure III-74:** Débit de benzène (kmol/s) en fonction de la fraction molaire du produit (DEB).

- **Inférences des tableaux et graphiques**

En analysant soigneusement les tableaux et les graphes, nous aurons les conclusions suivantes.

L'augmentation du débit d'alimentation en benzène jusqu'à 0,4 kmol / s conduit à la maximisation du produit. L`augmentation du débit d'alimentation plus de 0,4 Kmol / s n'a aucun effet sur la formation du produit par contre s`augmente le coût de séparation. Ainsi, la

combinaison optimale de débit d'alimentation du benzène est F (B) = 0,4 kmol / s et l'éthylène est F (E) = 0,2 kmol / s.

## B. Optimisation de la température du réacteur

De la même manière que l`opération précèdent, nous fixons le débit d'alimentation du benzène F (B) = 0,4 et de l'éthylène F (E) = 0,2 kmol /s, volume du réacteur V ($m^3$) = 300 $m^3$.

En faisant varier la température du réacteur T (k) = 410,420,430,440,450,460,470 et 480, exécutez la simulation et les résultats de flux obtenus ont été présentés dans le tableau III.22.

**Tableau III-22 :** Comparaison entre la température du réacteur et le débit du produit.

| Température T(K) | Débit de produits (kmol/s) | | | |
|---|---|---|---|---|
| | Benzène | Éthylène | Éthylbenzène | Diéthylbenzène |
| 410 | 0,243 | 0,043 | 0,157 | $4{,}86\ 10^{-6}$ |
| 420 | 0,223 | 0,023 | 0,177 | $7{,}20\ 10^{-6}$ |
| 430 | 0,207 | 0,007 | 0,193 | $9{,}86\ 10^{-6}$ |
| 440 | 0,203 | 0,003 | 0,197 | $1{,}13\ 10^{-5}$ |
| 450 | 0,202 | 0,002 | 0,198 | $1{,}24\ 10^{-5}$ |
| 460 | 0,226 | 0,026 | 0,174 | $1{,}08\ 10^{-5}$ |
| 470 | 0,277 | 0,077 | 0,123 | $9{,}92\ 10^{-6}$ |
| 480 | 0,4 | 0,2 | $2.5\ 10^{-7}$ | $2{,}94\ 10^{-11}$ |

**Tableau III-23 :** Comparaison entre la température du réacteur et la fraction molaire du produit.

| Température T(K) | Fraction molaire du produit | | | |
|---|---|---|---|---|
| | Benzène | Éthylène | Éthylbenzène | Diéthylbenzène |
| 410 | 0,548 | 0,097 | 0,355 | $1{,}099\ 10^{-5}$ |
| 420 | 0,527 | 0,054 | 0,419 | $1{,}711\ 10^{-5}$ |
| 430 | 0,509 | 0,017 | 0,474 | $2{,}420\ 10^{-5}$ |
| 440 | 0,503 | 0,006 | 0,490 | $2{,}811\ 10^{-5}$ |
| 450 | 0,502 | 0,004 | 0,493 | $3{,}084\ 10^{-5}$ |
| 460 | 0,531 | 0,061 | 0,408 | $2{,}541\ 10^{-5}$ |
| 470 | 0,580 | 0,161 | 0,259 | $2{,}079\ 10^{-5}$ |
| 480 | 0,667 | 0,333 | $4{,}18310^{-7}$ | $4{,}895\ 10^{-11}$ |

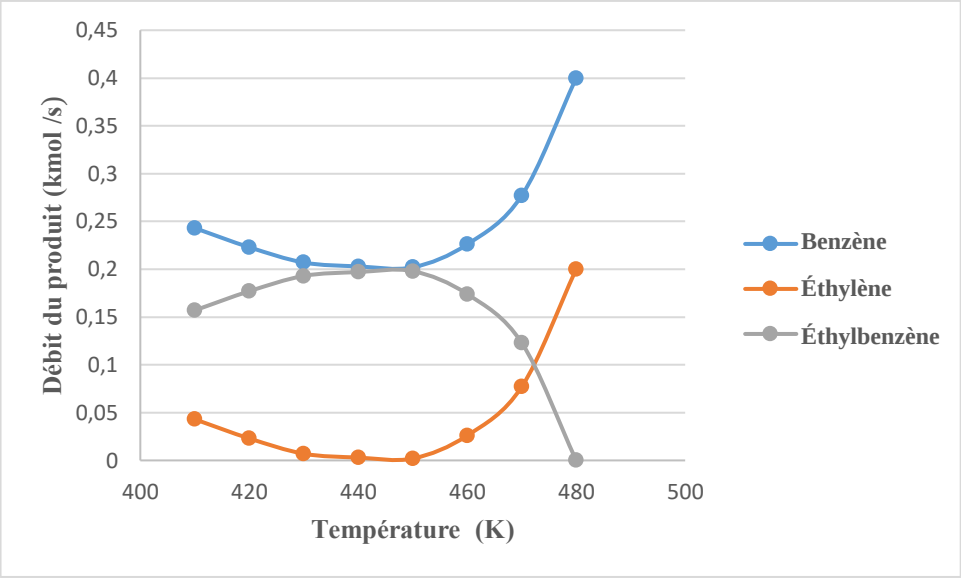



**Figure III-75:** Température du réacteur vs débit du produit.

**Tableau III-24 :** Comparaison entre la température du réacteur avec la fraction molaire de di-éthylbenzène.

| Température du réacteur T(K) | Fraction molaire de DEB |
|---|---|
| 410 | $1{,}099\ 10^{-5}$ |
| 420 | $1{,}711\ 10^{-5}$ |
| 430 | $2{,}420\ 10^{-5}$ |
| 440 | $2{,}811\ 10^{-5}$ |
| 450 | $3{,}084\ 10^{-5}$ |
| 460 | $2{,}541\ 10^{-5}$ |
| 470 | $2{,}079\ 10^{-5}$ |
| 480 | $4{,}895\ 10^{-11}$ |

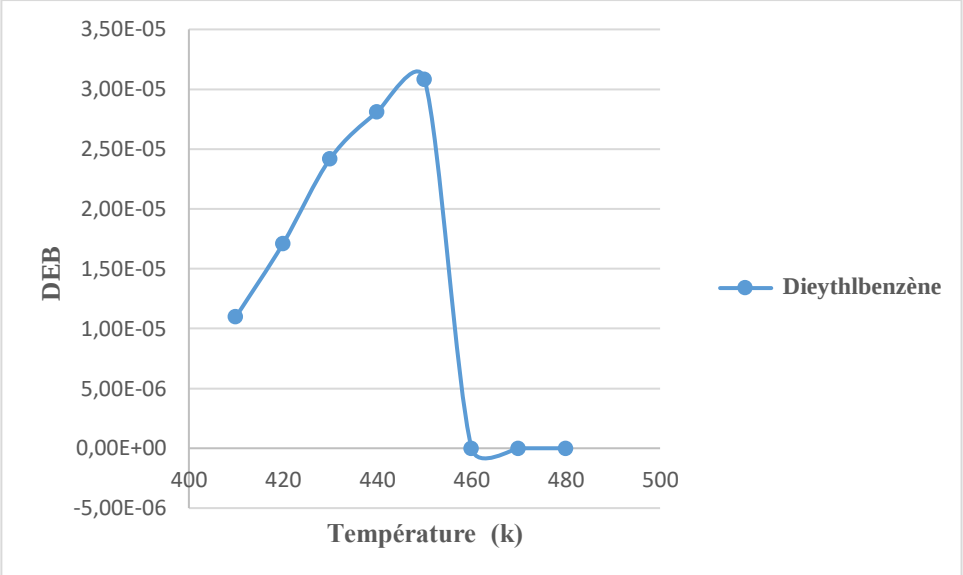



**Figure III-76:** Température du réacteur vs fraction molaire du produit (DEB).

- **Inférences à partir des graphiques et des tableaux**

En analysant soigneusement les tableaux et les graphes, nous aurons les conclusions suivantes.

En augmentant la température du réacteur, on favorise la formation du produit, c'est à-dire l'éthylbenzène.

La température optimale du réacteur est donc T (k) = 430 K.

## C. Optimisation du volume du réacteur

De la même manière que le choix de température optimal, nous fixons le débit d'alimentation du benzène F (B) = 0,4 et Éthylène F (E) = 0,2 kmol /s, température du réacteur T (K) = 430 K.

En faisant varier le volume du réacteur V ($m^3$) = 280, 290, 300, 310, 320, et 330, exécuter la simulation et obtenir le résultat du flux a été tabulé comme suit.

**Tableau III-25 :** Comparaison entre le volume du réacteur et le débit de la production.

| Volume du réacteur ($m^3$) | Débit de la production (kmole/s) | | | |
|---|---|---|---|---|
| | Benzène | Éthylène | Éthylbenzène | Diéthylbenzène |
| 280 | 0,215 | 0,015 | 0,185 | $8,88\ 10^{-6}$ |
| 290 | 0,211 | 0,011 | 0,189 | $9,44\ 10^{-6}$ |
| 300 | 0,207 | 0,007 | 0,193 | $9,70\ 10^{-6}$ |
| 310 | 0,204 | 0,004 | 0,196 | $1,03\ 10^{-6}$ |
| 320 | 0,204 | 0,004 | 0,196 | $1,03\ 10^{-6}$ |
| 330 | 0,204 | 0,004 | 0,196 | $1,03\ 10^{-6}$ |

**Tableau III-26 :** Comparaison entre le volume du réacteur et la fraction molaire du produit.

| Volume du réacteur ($m^3$) | Fraction molaire du produits | | | |
|---|---|---|---|---|
| | Benzène | Éthylène | Éthylbenzène | Diéthylbenzène |
| 280 | 0,518 | 0,037 | 0,445 | $2,122\ 10^{-5}$ |
| 290 | 0,513 | 0,027 | 0,459 | $2,269\ 10^{-5}$ |
| 300 | 0,509 | 0,017 | 0,474 | $2,419\ 10^{-5}$ |
| 310 | 0,505 | 0,009 | 0,486 | $2,543\ 10^{-5}$ |
| 320 | 0,505 | 0,009 | 0,486 | $2,548\ 10^{-5}$ |
| 330 | 0,504 | 0,009 | 0,487 | $2,553\ 10^{-5}$ |

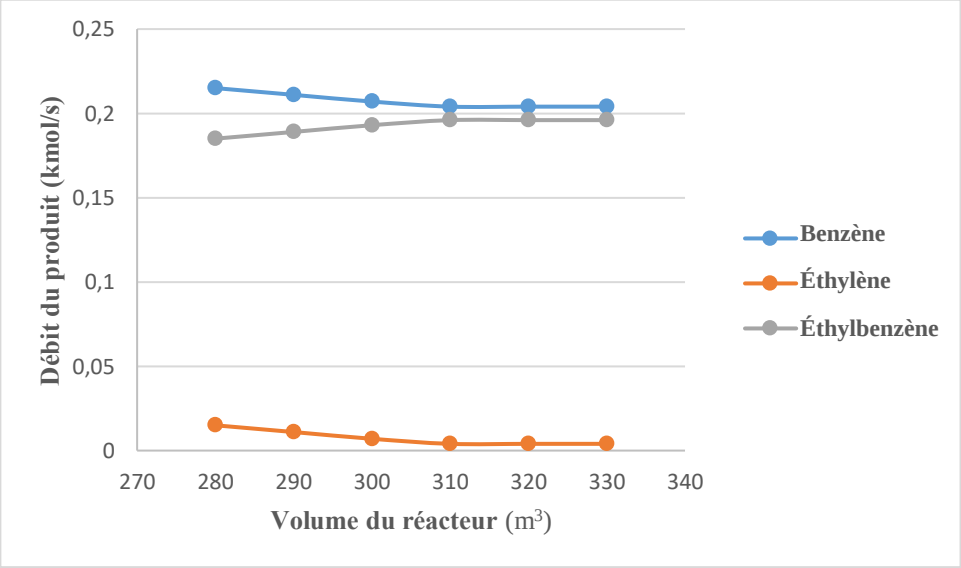



**Figure III-77:** Volume du réacteur vs débit du produit.

**Tableau III-27 :** Comparaison entre le volume du réacteur avec la fraction molaire de di-éthylbenzène.

| Volume du réacteur ($m^3$) | Fraction molaire de DEB |
|---|---|
| 280 | $2{,}122\ 10^{-5}$ |
| 290 | $2{,}269\ 10^{-5}$ |
| 300 | $2{,}419\ 10^{-5}$ |
| 310 | $2{,}543\ 10^{-5}$ |
| 320 | $2{,}548\ 10^{-5}$ |
| 330 | $2{,}553\ 10^{-5}$ |

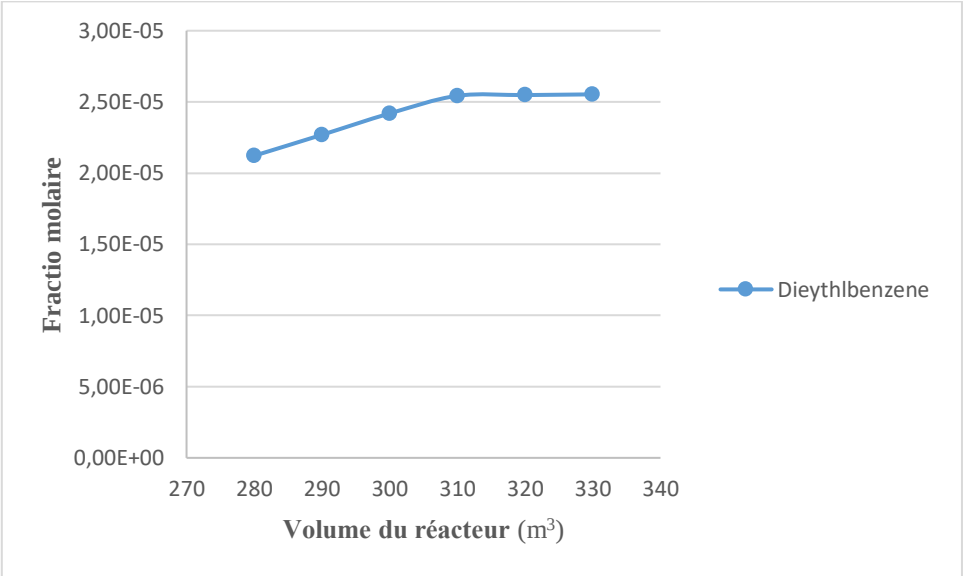



**Figure III-78:** Volume du réacteur vs DEB.

- **Inférences à partir de graphiques et de tableaux**

En analysant soigneusement les tableaux et les graphes, nous aurons les conclusions suivantes.

L'augmentation du volume du réacteur favorise la formation simultanée du produit souhaité et du produit indésirable. L'augmentation du volume du réacteur n'est pas également économiquement réalisable. Comme il s'agit d'une réaction exothermique, nous devons maintenir un volume de réacteur minimum pour le refroidissement, la température optimale du réacteur est donc T (K) = 430.

À partir de ci-dessus, nous aurons les valeurs optimales pour le débit d'alimentation, la température du réacteur et le volume du réacteur. Mettre ces valeurs optimales dans le hysys et exécuter la simulation et obtenir le tableau de flux qui est montré ci-dessous.

**Tableau III-28 :** Résultant de flux pour la simulation d'état stable.

| Préparation de éthylbenzène | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Courant | | FB | FE | R1-OUT | V1-OUT | V2-OUT | V3-OUT |
| Température | K | 298 | 298 | 430 | 298,2 | 292,5 | 430,095 |
| Pression | kPa | 1519875 | 1519875 | 1013250 | 1013250 | 1013250 | 506625 |
| Frac de vapeur | | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Flux de mole | kmol/s | 0,4 | 0,2 | 0,407 | 0,4 | 0,2 | 0,407 |
| Flux de masse | kg/s | 31,25 | 5,61 | 36,86 | 31,25 | 5,61 | 36,86 |
| Débit volumique | $m^3/s$ | 0,035 | 0,015 | 0,042 | 0,035 | 0,015 | 0,042 |
| Débit molaire | kmol/s | | | | | | |
| B | | 0,4 | 0 | 0,207 | 0,4 | 0 | 0,207 |
| E | | 0 | 0,2 | 0,007 | 0 | 0,2 | 0,007 |
| EB | | 0 | 0 | 0,193 | 0 | 0 | 0,193 |
| DEB | | 0 | 0 | $9,8\ 10^{-6}$ | 0 | 0 | $9,8\ 10^{-6}$ |
| Frac de mole | | | | | | | |
| B | | 1 | 0 | 0,509 | 1 | 0 | 0,509 |
| E | | 0 | 1 | 0,017 | 0 | 1 | 0,017 |
| EB | | 0 | 0 | 0,474 | 0 | 0 | 0,474 |
| DEB | | 0 | 0 | $2,42\ 10^{-5}$ | 0 | 0 | $2,42\ 10^{-5}$ |

## D. Simulation dans un réacteur CSTR en séries

### Organigramme pour CSTR en série

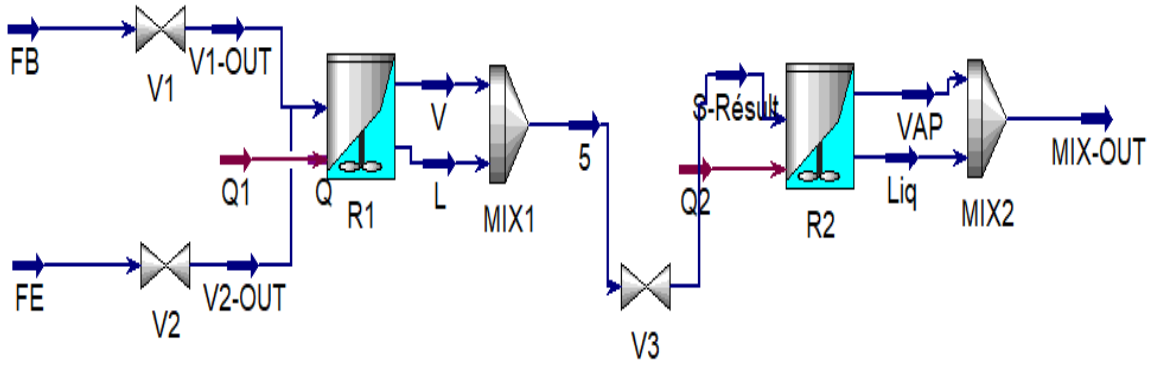



**Figure II-79:** Schéma de principe pour la série CSTR.

On constate que le rapport de taille optimal de deux CSTR en série dépend de la cinétique de réaction et au niveau de la conversion.

Pour les réactions avec une cinétique de premier ordre, les CSTR de taille égale sont les meilleurs. Pour des réactions avec ordre supérieur à un, le CSTR de plus petite taille doit être suivi du plus grand et pour les réactions avec une commande inférieure à un, le CSTR de plus grande taille doit être suivi d'un autre de plus petite taille.

## E. Simulation pour un ratio de taille optimal

Ici, nous prenons deux réacteurs au lieu d'un seul réacteur ayant un volume combiné égal à volume d'un seul réacteur. Utilisez les mêmes valeurs optimales comme le débit d'alimentation, la température du réacteur est utilisée dans le cas précédent. Exécutez la simulation pour diverses combinaisons de volume de réacteur comme ((290,10), (280,20), (270,30), (260, 40), (250,50), (260,40), (270,30), (280,20), (290,10)) et l'obtention des résultats du flux sont présentés comme suit.

**Tableau III-29 :** Comparaison entre les volumes du réacteur et le débit de produit de R1 et R2.

| Volumes du réaction ($m^3$) | | Débit de produit (kmol/s) de R1 et R2 | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| R1 | R2 | R1(B) | R1(E) | R1(EB) | R2(B) | R2(E) | R2(EB) |
| 290 | 10 | 0,211 | 0,011 | 0,189 | 0,204 | 0,004 | 0,196 |
| 280 | 20 | 0,215 | 0,015 | 0,185 | 0,202 | 0,002 | 0,198 |
| 270 | 30 | 0,019 | 0,220 | 0,180 | 0,202 | 0,001 | 0,198 |
| 260 | 40 | 0,024 | 0,224 | 0,176 | 0,203 | 0,003 | 0,197 |
| 250 | 50 | 0,029 | 0,229 | 0,171 | 0,204 | 0,004 | 0,196 |
| 240 | 60 | 0,034 | 0,234 | 0,166 | 0,206 | 0,006 | 0,194 |
| 230 | 70 | 0,039 | 0,239 | 0,161 | 0,209 | 0,009 | 0,191 |
| 220 | 80 | 0,044 | 0,244 | 0,156 | 0,211 | 0,011 | 0,189 |
| 210 | 90 | 0,049 | 0,249 | 0,151 | 0,214 | 0,014 | 0,186 |

**Tableau III-30 :** Comparaison entre les volumes du réacteur et la mole de produit de R1 et R2.

| Volumes du réaction ($m^3$) | | Fraction molaire de R1 et R2 | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| R1 | R2 | R1(B) | R1(E) | R1(EB) | R2(B) | R2(E) | R2(EB) |
| 290 | 10 | 0,513 | 0,027 | 0,459 | 0,505 | 0,010 | 0,485 |
| 280 | 20 | 0,518 | 0,037 | 0,445 | 0,502 | 0,005 | 0,493 |
| 270 | 30 | 0,523 | 0,047 | 0,429 | 0,502 | 0,004 | 0,494 |
| 260 | 40 | 0,529 | 0,057 | 0,414 | 0,503 | 0,007 | 0,490 |
| 250 | 50 | 0,534 | 0,067 | 0,399 | 0,505 | 0,011 | 0,484 |
| 240 | 60 | 0,539 | 0,077 | 0,384 | 0,508 | 0,016 | 0,476 |
| 230 | 70 | 0,544 | 0,088 | 0,368 | 0,511 | 0,021 | 0,468 |
| 220 | 80 | 0,549 | 0,098 | 0,352 | 0,512 | 0,027 | 0,459 |
| 210 | 90 | 0,555 | 0,109 | 0,336 | 0,516 | 0,033 | 0,451 |

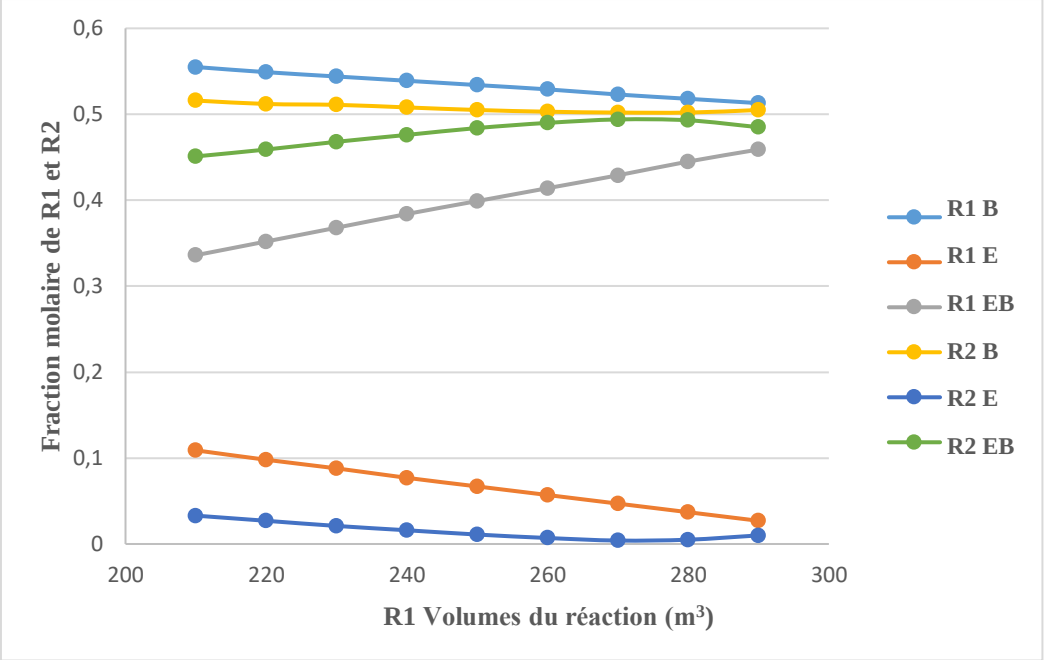



**Figure III-80:** R1 et courbes de fraction molaire.

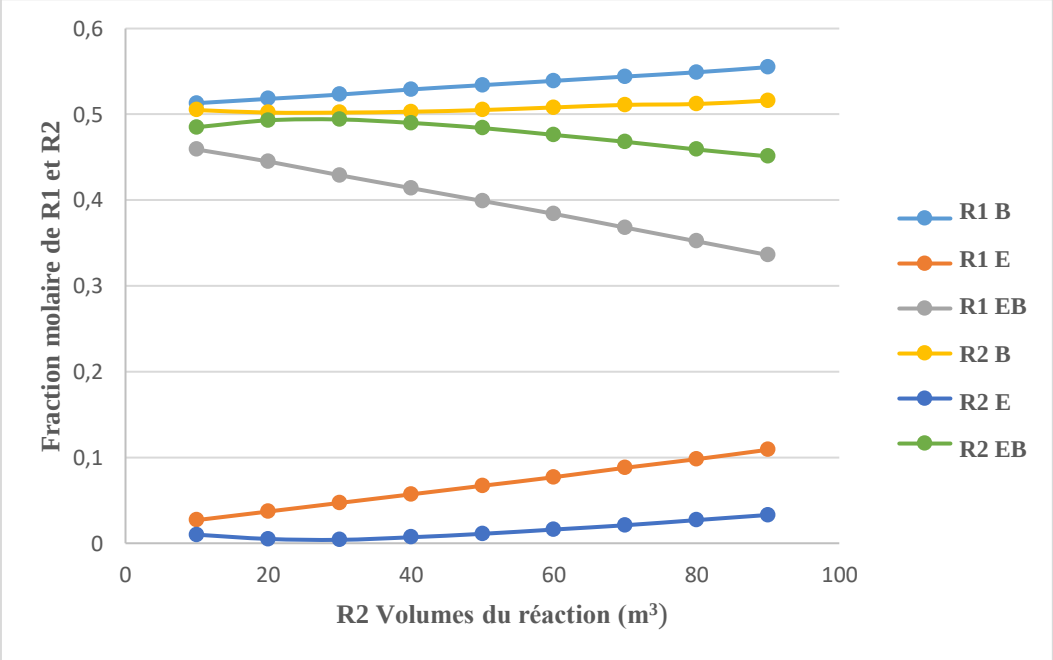



**Figure III-81:** R2 et courbes de la fraction molaire du produit.

**Tableau III-31 :** Comparaison entre R1 volume ($m^3$) et formation de DEB dans R1 et R2.

| Volume R1 ($m^3$) | R1 (DEB) | R2 (DEB) |
|---|---|---|
| 290 | $2,27\ 10^{-5}$ | $2,41\ 10^{-5}$ |
| 280 | $2,12\ 10^{-5}$ | $2,42\ 10^{-5}$ |
| 270 | $1,98\ 10^{-5}$ | $2,37\ 10^{-5}$ |
| 260 | $1,84\ 10^{-5}$ | $2,3110^{-5}$ |
| 250 | $1,71\ 10^{-5}$ | $2,24\ 10^{-5}$ |
| 240 | $1,58\ 10^{-5}$ | $2,17\ 10^{-5}$ |
| 230 | $1,46\ 10^{-5}$ | $2,10\ 10^{-5}$ |
| 220 | $1,34\ 10^{-5}$ | $2,03\ 10^{-5}$ |
| 210 | $1,23\ 10^{-5}$ | $1,98\ 10^{-5}$ |

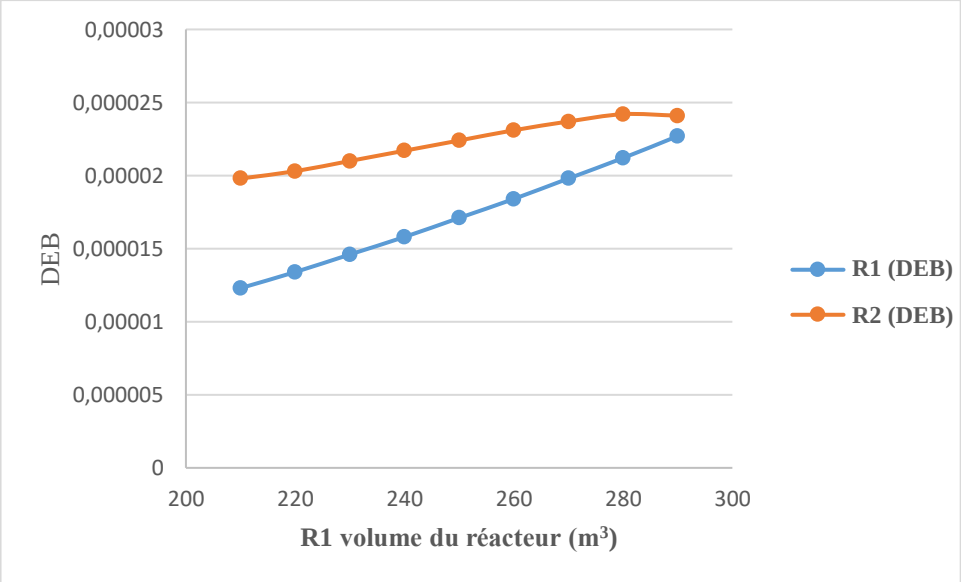



**Figure III-82:** Tracé entre le volume du réacteur R1 vs DEB.

**Tableau III-32 :** Comparaison entre R2 volume ($m^3$) et formation de DEB dans R1 et R2.

| Volume R2 ($m^3$) | R1 (DEB) | R2 (DEB) |
|---|---|---|
| 10 | $2{,}27\ 10^{-5}$ | $2{,}41\ 10^{-5}$ |
| 20 | $2{,}12\ 10^{-5}$ | $2{,}42\ 10^{-5}$ |
| 30 | $1{,}98\ 10^{-5}$ | $2{,}37\ 10^{-5}$ |
| 40 | $1{,}84\ 10^{-5}$ | $2{,}3110^{-5}$ |
| 50 | $1{,}71\ 10^{-5}$ | $2{,}24\ 10^{-5}$ |
| 60 | $1{,}58\ 10^{-5}$ | $2{,}17\ 10^{-5}$ |
| 70 | $1{,}46\ 10^{-5}$ | $2{,}10\ 10^{-5}$ |
| 80 | $1{,}34\ \ 10^{-5}$ | $2{,}03\ 10^{-5}$ |
| 90 | $1{,}23\ 10^{-5}$ | $1{,}98\ 10^{-5}$ |

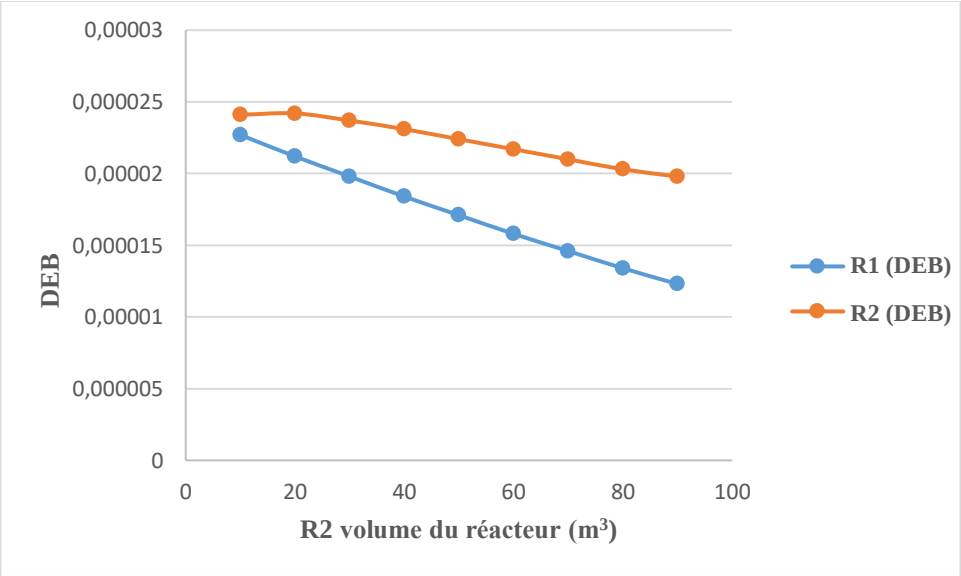



**Figure III-83:** Tracé entre le volume du réacteur R2 vs DEB.

## F. Inférences à partir de graphiques et de tableaux

En analysant soigneusement les tableaux de données et les graphes, nous aurons les conclusions suivantes.

Dans un premier temps, nous commençons la simulation avec le volume du réacteur R1 = 290 & R2 = 10 et avec l'augmentation du volume du réacteur R1 nous pouvons observer une augmentation de la formation de production l'augmentation encore du volume

du réacteur au-delà d'une certaine limite, c'est-à-dire R1 = 280 ($m^3$), favorise la formation de produit à savoir le diéthylbenzène. La combinaison optimale de volume de réacteur est donc R1 = 280 et R2 = 20 $m^3$. Mettons toutes ces valeurs et la simulation d'exécution, nous obtiendrons le tableau de flux suivant.

**Tableau III-33 :** Résultant de flux pour la simulation CSRT en série.

| Préparation de éthylbenzène | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Courant | | FB | FE | R1-OUT | R2-OUT | V1-OUT | V2-OUT | V3-OUT |
| Température | K | 298 | 298 | 430 | 430 | 292,53 | 298,22 | 429,95 |
| Pression | KPa | 1519875 | 1519875 | 1013250 | 1013250 | 1013250 | 1013250 | 10 |
| Frac de vapeur | | 0 | 1 | 0,130 | 0,077 | 1 | 0 | 0,130 |
| Flux molaire | kmol/s | 0,4 | 0,2 | 0,43 | 0,41 | 0,4 | 0,2 | 0,43 |
| Flux de masse | kg/s | 31,25 | 5,61 | 36,86 | 36,86 | 31,25 | 5,61 | 36,86 |
| Débit volumique | $m^3/s$ | 0,035 | 0,015 | 0,043 | 0,042 | 0,015 | 0,035 | 0,043 |
| Débit molaire | kmol/s | | | | | | | |
| B | | 0,4 | 0 | 0,215 | 0,202 | 0,4 | 0 | 0,215 |
| E | | 0 | 0,2 | 0,015 | 0,002 | 0 | 0,2 | 0,015 |
| EB | | 0 | 0 | 0,185 | 0,198 | 0 | 0 | 0,198 |
| DEB | | 0 | 0 | $6,86\ 10^{-6}$ | $8,8\ 10^{-6}$ | 0 | 0 | $6,86\ 10^{-6}$ |
| Fractions molaire | | | | | | | | |
| B | | 1 | 0 | 0,518 | 0,502 | 1 | 0 | 0,539 |
| E | | 0 | 1 | 0,037 | 0,005 | 0 | 1 | 0,078 |
| EB | | 0 | 0 | 0,445 | 0,493 | 0 | 0 | 0,384 |
| DEB | | 0 | 0 | $1,58\ 10^{-5}$ | $2,17\ 10^{-5}$ | 0 | 0 | $1,58\ 10^{-5}$ |

La « conversion » du réactif (B ou E) et le « rendement » du produit EB souhaité, sont calculés comme indiqué dans les équations (III.7), (III.8), (III.9), (III.10).

**Tableau III-34 :** Comparaison entre la température du réacteur et la conversion et le rendement.

| T(K) | X( B) | X( E ) | Y(EB/B) | Y(EB/E) |
|---|---|---|---|---|
| 410 | 0,39 | 0,79 | 0,39 | 0,79 |
| 420 | 0,44 | 0,89 | 0,44 | 0,89 |
| 430 | 0,48 | 0,97 | 0,48 | 0,97 |
| 440 | 0,493 | 0,985 | 0,493 | 0,985 |
| 450 | 0,495 | 0,99 | 0,495 | 0,99 |
| 460 | 0,435 | 0,87 | 0,435 | 0,87 |
| 470 | 0,31 | 0,62 | 0,31 | 0,62 |
| 480 | - | - | - | - |

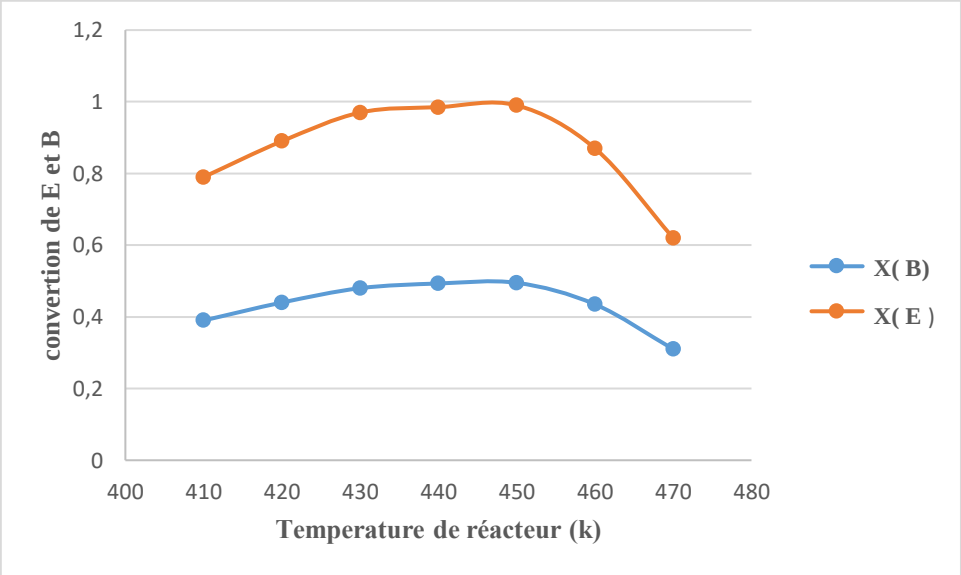



**Figure III-84**: Tracé entre la température du réacteur et la conversion de B & E.

**Tableau III-35** : Comparaison entre le volume du réacteur et la conversion et le rendement.

| Volume de Réacteur ($m^3$) | X( B) | X( E ) | Y(EB/B) | Y(EB/E) |
|---|---|---|---|---|
| 280 | 0,46 | 0,93 | 0,46 | 0,93 |
| 290 | 0,47 | 0,95 | 0,47 | 0,95 |
| 300 | 0,48 | 0,97 | 0,48 | 0,97 |
| 310 | 0,49 | 0,98 | 0,49 | 0,98 |
| 320 | 0,49 | 0,98 | 0,49 | 0,98 |
| 330 | 0,49 | 0,98 | 0,49 | 0,98 |

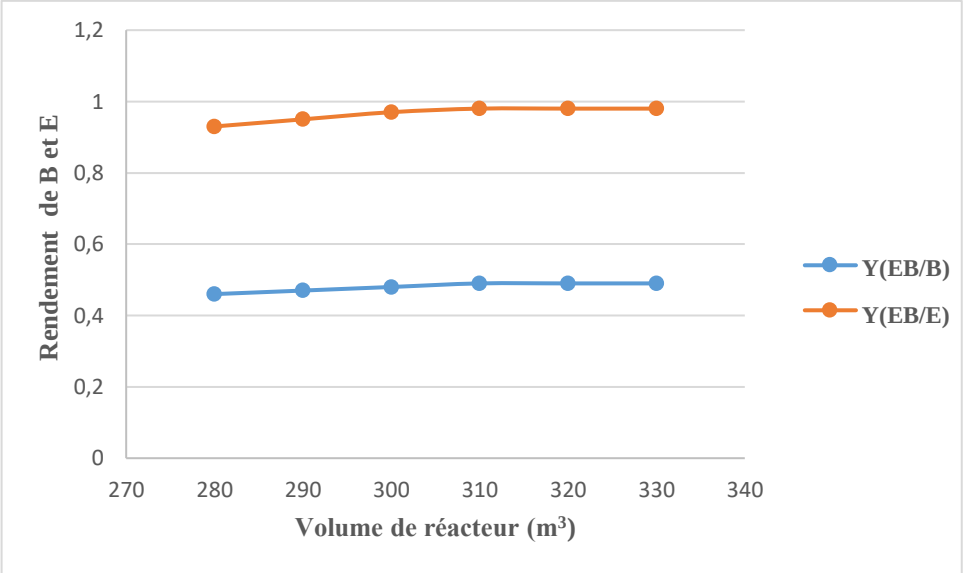



**Figure III-85**: Tracé entre le volume du réacteur et le rendement de B & E

**Tableau III-36:** Comparaison entre le débit d'alimentation vs la conversion et le rendement.

| Débit d'alimentation de benzène (kmol/s) | X( B) | X( E ) | Y(EB/B) | Y(EB/E) |
|---|---|---|---|---|
| 0,100 | 0,925 | 0,365 | 0,925 | 0,365 |
| 0,200 | 0,82 | 0,63 | 0,82 | 0,63 |
| 0,300 | 0,665 | 0,83 | 0,665 | 0,83 |
| 0,400 | 0,483 | 0,965 | 0,483 | 0,965 |
| 0,500 | 0,24 | 0,80 | 0,24 | 0,80 |
| 0,600 | - | 0,80 | - | 0,80 |

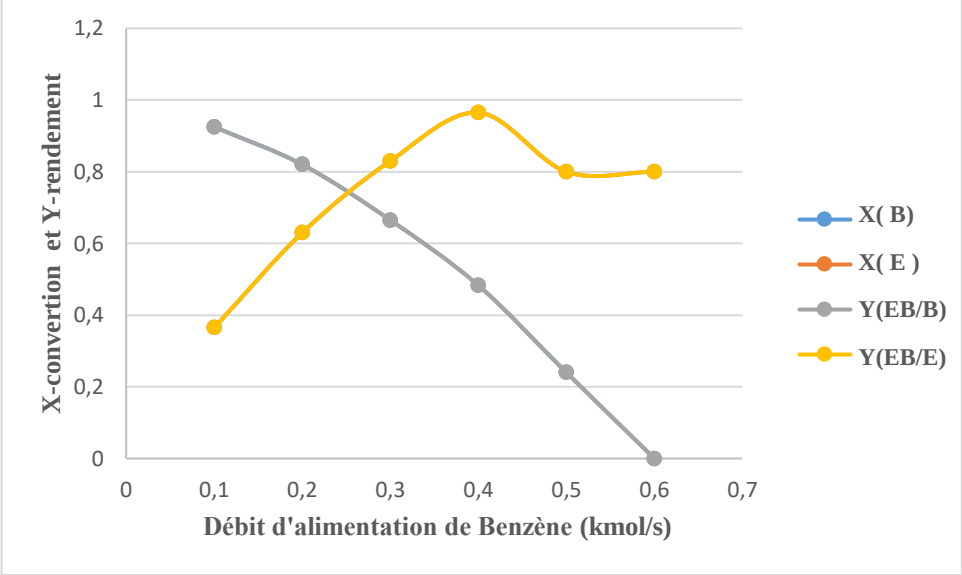



**Figure III-86:** Tracé entre le débit d'alimentation en fonction de la conversion et du rendement.

**Inférences:**

En analysant soigneusement le tableau et les graphes ci-dessus, nous aurons les conclusions suivantes.

À la température optimale du réacteur (T = 430 K), le volume du réacteur (V = 300 $m^3$) et le débit d'alimentation (kmol / s) (F (B) = 0,4, F (E) = 0,2) on obtient la réaction à une conversion et un rendement maximum.

Les valeurs de conversion et de rendement pour les réacteurs à cuve unique sont :

Conversion de benzène X (B) = 48,3%

Conversion d'éthylène X (E) = 96,5%

Rendement d'éthylbenzène Y (EB / B) = 48,3%

Rendement d'éthylbenzène Y (EB / E) = 96,5%

Les valeurs de conversion et de rendement du réacteur série CSTR sont :

Conversion de benzène X (B) = 48,5%

Conversion d'éthylène X (E) = 97%

Rendement d'éthylbenzène Y (EB / B) = 48,5%

Rendement d'éthylbenzène Y (EB / E) = 97%

**Discussion**

Pour le réacteur à cuve unique à la température optimale du réacteur T = 430 (k), le volume du réacteur V = 300 ($m^3$). Et le débit d'alimentation, c'est-à-dire le benzène F (B) = 0,4 et l'éthylène F (E) 0,2 kmol / s, la conversion du benzène et de l'éthylène était de 48,3% et 96,5%. Le rendement en éthylbenzène Y (EB / B) et Y (EB / E) s'est avéré être de 48,3% et 96,5%.

En remplaçant le réacteur unique par des réacteurs en série dont la somme des volumes est égale au volume du réacteur unique, les performances de la réaction peuvent être améliorées.

Pour la série CSTR dans les mêmes conditions de réaction, à savoir la température et le débit d'alimentation, la conversion du benzène et de l'éthylène s'est avérée être de 48,5% et 97%. Le rendement en éthylbenzène Y (EB / B) et Y (EB / E) était de 48,5% et 97%.

## III.7 Conclusion

Les conclusions tirées de ces études sont :

Les valeurs optimales ont été évaluées comme suit :

- La température optimale était estimée à 430 K.
- Le volume optimal du réacteur a été trouvé être de 100 $m^3$ pour Aspen plus et (300 $m^3$ pour Aspen Hysys avec un pourcentage volume de vide 60,30 % ).
- Les débits d'alimentation optimaux étaient de 0,4 kmol /s de benzène et 0,2 kmol /s de l'éthylène.
- Le rendement maximal en éthylbenzène devrait être de 49,75% de benzène et de 99,5% de l'éthylène.

# CONCLUSION GÉNÉRALE

Ce travail rapporte les résultats de simulation d'un réacteur continue parfaitement agité en régime stationnaire en utilisant les simulateurs des procédés Aspen Plus et Aspen Hysys. La réaction étudiée dans ce travail est la production d'éthylbenzène en utilisant de l'éthylène et du benzène comme réactifs.

Dans notre simulation, cet aspect particulier a été examiné pour maximiser la conversion de l'éthyle benzène de ses réactifs. Ici, nous avons étudié l'effet du débit d'alimentation sur l'état d'équilibre du comportement du CSTR et a également obtenu le débit d'alimentation optimal afin de maximiser la conversion et le rendement en tenant particulièrement compte des réactions consécutives où un produit a été souhaité et un autre était refusé.

Puisque l'effet de la température du réacteur allait toujours être crucial dans cette réaction exothermique, les valeurs optimales ont été évaluées. Le volume optimal du réacteur a également été découvert à partir des résultats de la simulation.

La température optimale était estimée à 430 K et le volume optimal du réacteur était de 100 $m^3$. Les débits d'alimentation optimaux étaient de 0,4 kmol /s avec du benzène et 0,2 kmol/s avec de l'éthylène.

Le rendement maximal en éthylbenzène était estimé à 49,75% en poids de benzène et à 99,5% en poids d'éthylène.

Dans la continuité de ce travail, il peut être étendu à l'étude des aspects de simulation dynamique avec divers mécanismes de contrôle en place et à comprendre les paramètres et réglages du contrôleur. De même, différents volumes de réacteurs (variables de hold-up) peuvent également être utilisés en série pour étudier leur effet dans la conversion globale de cette réaction et optimiser les variables.

# BIBLIOGRAPHIE


**[1]** **Redjdal, M., H. Houd, and L. Lemouari.,** Simulation d'un réacteur parfaitement agite continu non isotherme.2017. Mémoire de master. Université Abderrahmane Mira–Bejaia, Algérie.

**[2]** **Maayedukondalu, T.S.,** Steady state simulation of continuous stirred tank reactor (CSTR) system using Aspen Plus, 2015. BTech thesis.

**[3]** **BELLIL, A.,** Optimisation d'un réacteur de production de l'ammoniaque. juin 2015. Mémoire de master. Université Mohamed Khider – Biskra, Algérie.

**[4]** **Scacchi, G.,** Cinétique et catalyse 2011: Tec & Doc Lavoisier.

**[5]** **Koller, E.,** Génie chimique 2001: Dunod.

**[6]** **Guisnet, M., S. Laforge, and D.Couton.,** Réactions et réacteurs chimiques: Cinétique chimique - Cours et exercices corrigés 2007: Ellipses.

**[7]** **Trambouze, P. and J.P.Euzen.,** Les réacteurs chimiques: de la conception à la mise en œuvre 2002: Editions Technip.

**[8]** **Benouared, A.,** Utilisation d'un controleur hybride flou-HGA.pour le controle d'un reacteur chimique du type CSTR, 2007, Mémoire de master. univ-blida1., Algérie.

**[9]** **Bendjaballah, m.,** Polycopie du cours Calculs de réacteurs. 2014.

**[10]** **Ghasem, N.,** Computer methods in chemical engineering 2011: CRC Press.

**[11]** **BOUDJEMAA, É.p.M.Y.,** Polycopie du TP simulation des procédés industriels conformément au programme officiel (L3 GP). 2016/2017.

**[12]** **Kumar Bommineni, S.a.and D.,** Dynamic Analysis of a CSTR using Aspen Dynamics. (ICCEBS'2012)

**[13]** **Dimian, A.,** Integrated design and simulation of chemical processes, Eds. 1st, 2003, Elsevier Netherlands.

**[14]** **Navarro-Amorós, M.A., R. Ruiz-Femenia, and J.A.Caballero.,** Integration of modular process simulators under the Generalized Disjunctive Programming framework for the structural flowsheet optimization. Computers & chemical engineering, 2014.67:p. 13-25.

**[15]** **Dimian, A.C., C.S. Bildea, and A.A.Kiss.,** Integrated design and simulation of chemical processes 2014: Elsevier.

**[16]** **Bounasla, N., krelifaoui,I.,** Simulation Statique de la Distillation Azéotropique en Utilisant le Simulateur de Procédés ASPEN PLUS® : Application aux Mélanges Binaires Acétone/Méthanol et Acétone/Chloroforme 2015-2016, Mémoire de master. Universite Yahia farés de Médéa, Algérie.

**[17]** **Adams, T.A.,** Learn Aspen plus in 24 Hours 2017: McGraw-Hill Education.

**[18]** **Joulia, X.,** Simulateurs de procédés 2008: Ed. Techniques Ingénieur.

**[19]** **Gerkens, C.,** Modélisation des grands systèmes chimiques: travaux pratiques. 2012.

**[20]** **Giwa, A. and S.Karacan.,** Simulation and optimization of ethyl acetate reactive packed distillation process using Aspen Hysys. The Online Journal of Science and Technology, 2012. 2(2): p. 57-63.

**[21]** **Hamid, M.K.A.,** Aspen HYSYS: An Introduction to Chemical Engineering Simulation: For Chemical Engineering Undergraduate Students 2013: LAP LAMBERT Academic Publishing.