

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE FERHAT ABBAS -SETIF

Faculté de Technologie

Département d'Electrotechnique



جامعة فرحات عباس سطيف

كلية التكنولوجيا

قسم: الإلكترونيات

Mémoire de Master

No. Réf. :/...../2012

Présenté au Département d'Electrotechnique

Domaine : Sciences et Technologie

Filière : Automatique

Spécialité : Commande des processus industriel

Réalisé par :

Rahli Oussama

Thème

Modélisation et commande d'un réacteur chimique

Soutenu le/...../..... devant la commission d'examen composée de :

Mokeddem diab	M.C.B	à l'Université de Sétif	Président
Lamamra athmane	M.C.A	à l'Université de Sétif	Directeur du Mémoire
Aggoun lakhedar	M.A.A	à l'Université de Sétif	Examineur
Reffoufi salim	M.A.A	à l'Université de Sétif	Examineur

Dédicaces

Je dédie ce modeste mémoire à mes parents qui ont su me soutenir tout au long de mes études, parfois me réconforter dans les moments difficiles, et qui sans eux je n'aurais pu effectuer ce travail.

Je dédie ce modeste travail :

A mon frère, et mes sœurs et petite fille de mon frère « IDRIS ».

A toutes ma famille.

A tous mes fidèles amis :

ISMAIL, YAKOUB, HASSNI, NOURDDINE, ALAOUA, ADEL, A.NOUR, TAKI,
RAMZI.

A tous promotion 2012/2011 de l'automatique, options CPI et SFPI

Mon dédicace va également à ceux qui ont participé de près ou de loin à l'aboutissement de mes efforts

RAHLI OUSSAMA

Remerciements

Je tiens à remercier tout premièrement Dieu le tout puissant pour la volonté, la santé et la patience, qu'il m'a donné durant toutes ces longues années.

Ainsi, je tiens également à exprimer mes vifs remerciements à mon encadreur Mr : A. LAMAMRA pour avoir d'abord proposée ce thème, pour suivi continuel tout le long de la réalisation de ce mémoire et qui n'a pas cessée de me donner ses conseils.

Je tiens à remercier vivement Mr : S. NACEF professeur en génies des procédés qui m'ont aidé à élaborer et réaliser ce mémoire.

Je remercie également tous les membres du jury pour l'intérêt qu'ils ont porté à mon travail :

- Dr. MOKEDDEM DIAB
- Dr. AGGOUN LAKHDAR
- Dr. REFFOUFI SALIM

Je tiens à remercier vivement toutes personnes qui m'ont aidé à élaborer et réaliser ce mémoire, ainsi à tous ceux qui m'a aidé de près ou de loin à accomplir ce travail.

En fin, je tiens à exprimer ma reconnaissance à tous mes amis et collègues pour le soutien moral et matériel...

Sétif, le...../...../2012

Sommaire

<i>Chapitre 01</i>	<i>1</i>
DESCRIPTION DES REACTEURS CHIMIQUES	1
1.1. Introduction	1
1.2. Généralités sur les réacteurs chimiques.....	1
1.2.1. Les réacteurs	1
1.2.2. Types de réacteurs	2
1.2.3. Structure d'un réacteur chimique :	3
1.3. Principales caractéristiques d'un réacteur chimique.....	4
1.3.1. Selon les phases en présence	4
1.3.2. Selon la circulation des phases	4
1.3.3. Selon le mode de fonctionnement (opérations).....	5
1.4. Principales caractéristiques d'une réaction chimique	8
1.5. Classification des réacteurs.....	8
1.6. Stœchiométrie	8
1.7. Formulation des bilans massique et enthalpie.....	9
1.8. Application des expressions générales des bilans aux différents types de réacteurs idéalisés....	10
1.8.1. Réacteur discontinu monophasique	10
1.8.2. Réacteur semi-continu monophasique	11
1.8.3. Réacteur tubulaire à écoulement piston	12
1.8.4. Réacteur continu parfaitement agité :	13
1.9. Comparaison des divers types de réacteurs.....	14
1.10. Conclusion.....	14
<i>Chapitre 02</i>	<i>15</i>
MODELISATION DES REACTEURS CHIMIQUES	15
2.1. Introduction	15
2.2. Relation entre l'automatique et les systèmes de régulation dans le génie des procédés.....	15
2.2.1. Grandeurs mesurées et régulées	16
2.2.2. Capteur	16
2.3. Généralité sur la modélisation.....	16
2.3.1. Processus	17
2.3.2. Modèles.....	17
2.3.3. But d'une modélisation	17

2.4. Présentation de l'environnement MATLAB/SIMULINK	18
2.4.1. MATLAB	18
2.4.2. SIMULINK.....	18
2.5. Modélisation des réacteurs chimique	19
2.5.1. Réacteur continu (parfaitement agité)	20
2.5.2. Réacteur discontinu (fermé)	31
2.6. Conclusion	33
 <i>Chapitre 03</i>	 35
SIMULATION DES DEUX REACTEURS.....	35
3.1. .Introduction	35
3.2. Simulation de réacteur discontinu.....	36
3.2.1. L'évolution de la température dans le réacteur.....	36
3.2.2. L'évolution de la température dans la double enveloppe.....	36
3.2.3. L'évolution de niveau de débit F_j	37
3.3. Simulation de réacteur continu	38
3.3.1. L'évolution de la température dans le réacteur.....	38
3.3.2. L'évolution de la température dans la double enveloppe.....	38
3.3.3. L'évolution de volume	39
3.3.4. L'évolution de concentration.....	39
3.3.5. L'évolution de niveau de débit F_j	40
3.4. Conclusion	40
CONCLUSION GENERALE	41

Liste des figures

Figure 1-1 Réaction en phase liquide dans un réacteur fermé.....	2
Figure 1-2 Réacteur parfaitement agité	Erreur ! Signet non défini.
Figure 1-3 Réacteur batch	Erreur ! Signet non défini.
Figure 1-4 Réacteur piston.....	Erreur ! Signet non défini.
Figure 1-5 Structure d'un réacteur chimique.....	Erreur ! Signet non défini.
Figure 1-6 Réacteur cuve à opération discontinue	Erreur ! Signet non défini.
Figure 1-7 Opération discontinue.....	Erreur ! Signet non défini.
Figure 1-8 Opération semi-continu	Erreur ! Signet non défini.
Figure 1-9 Opération continue.....	Erreur ! Signet non défini.
Figure 1-10 Réacteur cuve à opération continue.....	Erreur ! Signet non défini.
Figure 1-11 Schéma servant de base à l'établissement des bilans élémentaires de masse et d'enthalpie.....	Erreur ! Signet non défini.
Figure 1-12 Représentation d'élément de volume dans le réacteur discontinu	Erreur ! Signet non défini.
Figure 1-13 Représentation d'élément de volume dans le réacteur semi continu.....	Erreur ! Signet non défini.
Figure 1-14 Représentation d'élément de volume dans le réacteur tubulaire	Erreur ! Signet non défini.
Figure 1-15 Représentation d'élément de volume dans le réacteur parfaitement agité.	Erreur ! Signet non défini.
Figure 2- 1 Relation entre l'automatique et les systèmes de régulation.....	15
Figure 2- 2 Réacteur chimique en boucle ouvert.....	19
Figure 2- 3 Réacteur chimique en boucle fermée.....	19
Figure 2- 4 Schéma du Réacteur continu chimique avec double enveloppe.....	20
Figure 2- 5 Commande non linéaire géométrique du réacteur chimique avec placement des pôles.....	24
Figure 2- 6 Schémas blocs de La pompe.....	25
Figure 2- 7 Schémas blocs de la vanne de régulation.....	26
Figure 2- 8 Schémas blocs de l'échangeur de chaleur.....	27
Figure 2- 9 Régulation proportionnelle de niveau dans la double enveloppe.....	27
Figure 2- 10 Schéma bloc de réacteur continu.....	29
Figure 2- 11 Schéma du réacteur discontinu.....	31
Figure 2- 12 Schéma bloc de réacteur discontinu.....	32
Figure 3- 1 La température de réacteur.....	36
Figure 3- 2 La température de la double enveloppe.....	36
Figure 3- 3 Température de la double enveloppe en 100s.....	37
Figure 3- 4 L'évolution de niveau de débit.....	37
Figure 3- 5 La température de réacteur.....	38
Figure 3- 6 La température de la double enveloppe.....	38
Figure 3- 7 Température de la double enveloppe en 100s.....	39

Figure 3- 8 Volume réactionnel.....	39
Figure 3- 9 Concentration de l'espèce A.....	39
Figure 3- 10 L'évolution de niveau de débit.....	40

Liste des tableaux

Tableau 2- 1Caractéristiques de l'échangeur de chaleur.....	29
Tableau 2- 2Caractéristiques du réacteur continu.....	30
Tableau 2- 3Caractéristiques du réacteur discontinu.....	33

INTRODUCTION GENERALE

Les systèmes en génie des procédés sont régis par l'interaction mutuelle de plusieurs phénomènes de natures diverses associant des composants technologiques.

La modélisation s'implique dans une démarche d'étude de système pour obtenir des informations qualitatives et quantitatives sur son comportement et ses performances, ceci en toute abstraction du système réel.

Les méthodes de modélisation pour la représentation des systèmes sont nombreuses. Il n'existe pas dans l'absolu une méthode meilleure que les autres. Le concepteur cherche en pratique la méthode la mieux adaptée au problème posé. Chaque méthode de modélisation peut être classée selon son niveau de langage.

Dans ce travail nous avons développé la modélisation des réacteurs chimiques par l'outil MATLAB/SIMULINK. A l'aide des équations de bilan de la matière.

L'objectif principal de ce mémoire est de modéliser et valider les résultats obtenus des réacteurs chimiques par l'outil MATLAB/SIMULINK, ce mémoire est réparti de la manière suivante :

- Dans le premier chapitre, nous présentons d'abord les différents types de réacteurs et leurs caractéristiques principales.
- Le deuxième chapitre présente la modélisation des deux réacteurs chimiques, l'un réacteur discontinu (fermé), et le second réacteur continu parfaitement agité, avec présentation des différents accessoires de réacteur (pompe échangeur de chaleur, vanne).
- Le troisième chapitre donne les résultats de simulation de chaque réacteur, continu, discontinu, et montre la différence entre les deux réacteurs.

Chapitre 01

DESCRIPTION DES REACTEURS CHIMIQUES

1.1. Introduction

Dans la chimie, des opérations chimiques s'occupent essentiellement des réacteurs. Le réacteur est la deuxième étape de la représentation générale d'un procédé industriel. C'est l'étape de la transformation de la matière, où de nouvelles molécules sont créées.

Dans ce chapitre nous allons voir des points plus importants en génie de la réaction chimique tels que:

✓ *Généralité Sur Les Réacteurs chimiques.*

Principales caractéristiques d'un réacteur chimique.

Principales caractéristiques d'une réaction chimique.

Classification des réacteurs

Stœchiométrie.

Les bilans des matières

Comparaison des divers types de réacteurs

1.2. Généralités sur les réacteurs chimiques

1.2.1. Les réacteurs

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

Le réacteur est le cœur de tout procédé chimique. Ses performances contrôlent les coûts, et les modes d'opération des unités de séparation en amont et en aval de celui-ci, et donc l'économie globale du procédé. Des améliorations du réacteur ont généralement un impact considérable sur les procédés de séparation.

Par définition le réacteur est le volume des espèces en réaction (et non le volume du récipient utilisé). Ainsi dans un réacteur fermé opérant en phase liquide, le volume du mélange réactionnel,

donc du vrai réacteur, est souvent plus petit que le volume du récipient utilisé ,fig (1.01) . [1].[2]

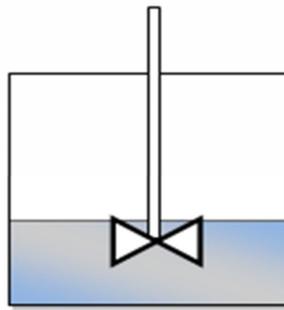


Figure 1- 1 Réaction en phase liquide dans un réacteur fermé

1.2.2. Types de réacteurs

Actuellement et pour encore un petit temps, il est considéré qu'il y a deux types de réacteurs chimiques industriels. Qui sont la cuve et le tube.

1.2.2.1. Réacteur Cuve

Le réacteur cuve est un récipient où les trois dimensions sont comparables. Il est presque toujours muni d'un dispositif qui assure une agitation du mélange réactionnel. Le rapport surface sur volume n'est pas très grand, dans cette catégorie, il y a deux modèles représentés par les figures (1.02), (1.03). [3].



Figure 1-1 Réacteur parfaitement agité

Agitation uniforme, la composition est la même au sein du réacteur et à la sortie.



Figure 1-2 Réacteur batch

Composition uniforme dans tout le réacteur mais elle se change en fonction du temps

1.2.2.2. Tube ou piston

Le réacteur est un tube caractérisé par une certaine longueur où le mélange réactionnel se déplace à la manière d'un piston. Le rapport surface sur volume est assez grand, la figure (1.04) montre ce type de réacteur.



Figure 1-3 Réacteur piston

1.2.3. Structure d'un réacteur chimique :

La figure (1.05) représente la structure générale d'un réacteur chimique. [1]

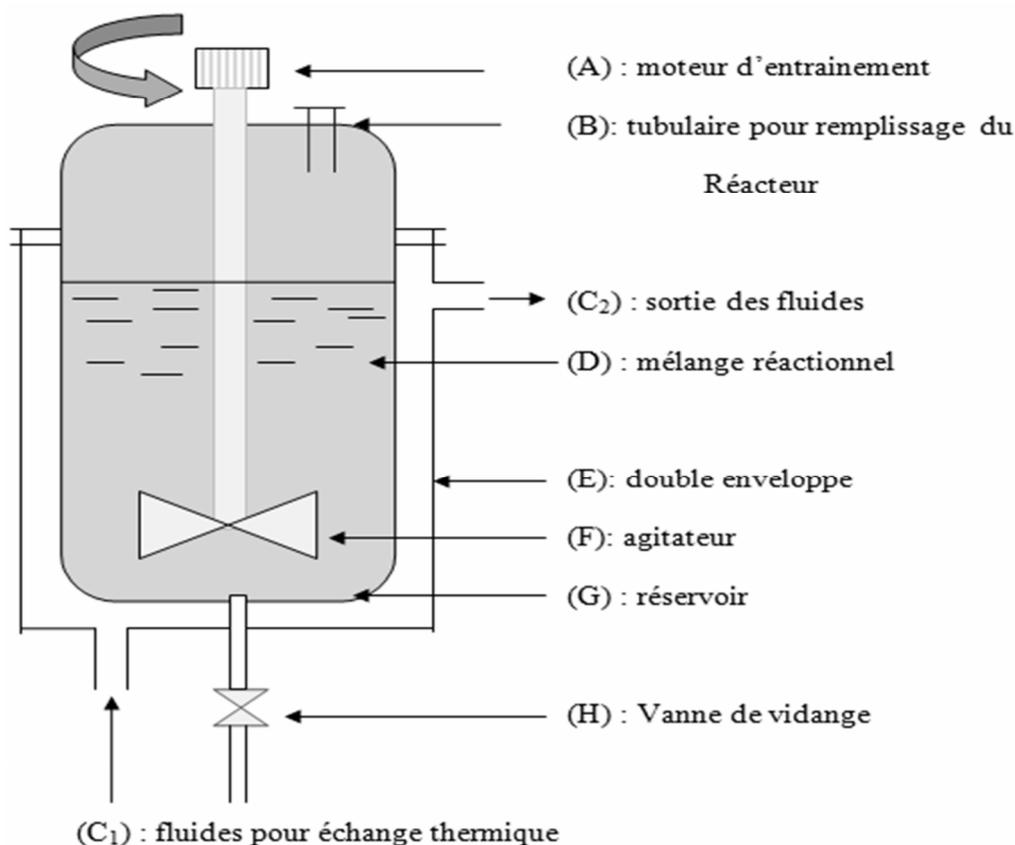


Figure 1-4 Structure d'un réacteur chimique

1.3. Principales caractéristiques d'un réacteur chimique

Parmi toutes les caractéristiques précédentes nous retiendrons en priorité pour servir de base à notre classification, celle qui est la plus apparente à l'échelle macroscopique, à savoir le nombre et la nature des phases en présence. [1]

1.3.1. Selon les phases en présence

On fera une première distinction entre les diverses phases

Systèmes monophasiques

Les réactions peuvent se dérouler totalement en phase vapeur ou liquide, il est alors dit que la réaction a lieu en phase homogène.

Systèmes polyphasiques

Les réactions se déroulent dans deux ou plusieurs phases, c'est-à-dire de combinaisons entre les phases vapeur, liquide(s) et solide(s), alors les réactions se passent en phase hétérogène.

1.3.2. Selon la circulation des phases

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

circulation des phases : à contre courant, à courant parallèles ou à courant croisé.

1.3.3. Selon le mode de fonctionnement (opérations)

Il est reconnu qu'un réacteur peut fonctionner selon 3 sortes d'opérations. [1]. [3]

1.3.3.1. Opération discontinue

Dans l'opération discontinue un modèle assez fréquent, de taille forte variable, est celui du réacteur cuve discontinu, figure (1.06).

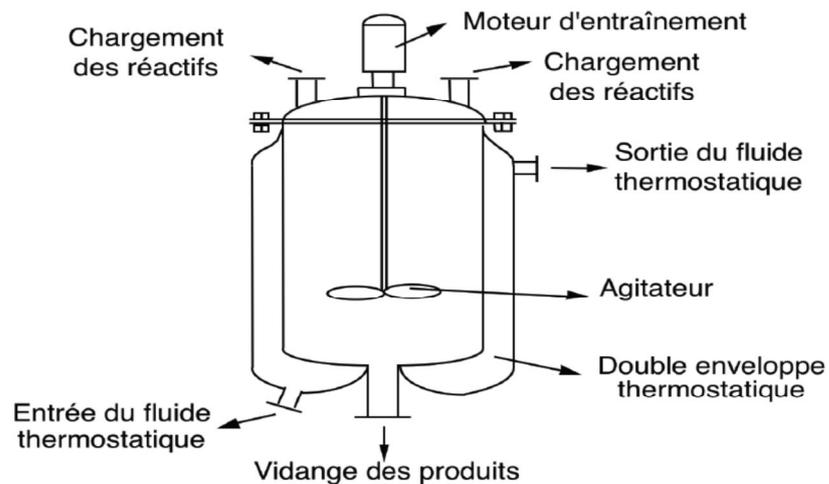


Figure 1-5 Réacteur cuve à opération discontinue

Dans une opération discontinue, les réactifs sont chargés dans le réacteur en début d'opération, les produits sont retirés quand la transformation est considérée comme terminée.

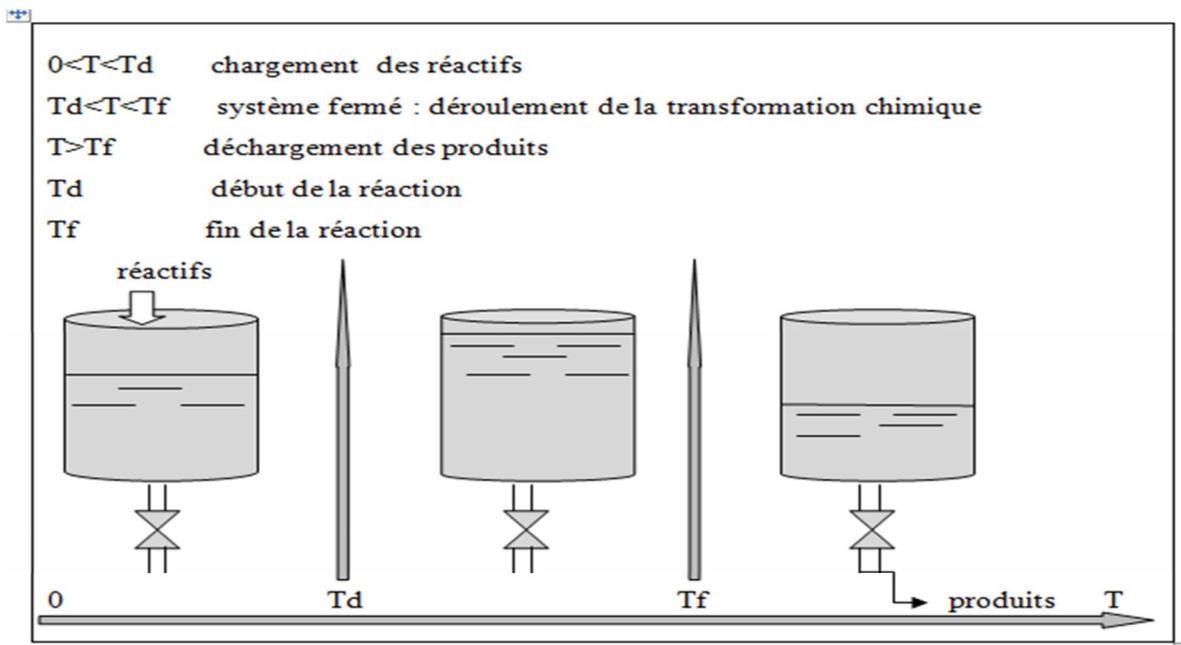


Figure 1-6 Opération discontinue

1.3.3.2. Opération semi-continue

Une variante du système discontinu est réalisée lorsqu'une partie des réactifs est introduite tout au long de l'opération, le déchargement des produits se faisant là encore à la fin de l'opération. On qualifie ce mode d'opération de semi - continue. On trouve également des cas où les réactifs étant chargés au début de l'opération, certains produits de la réaction sont progressivement éliminés, tandis que la transformation se déroule.

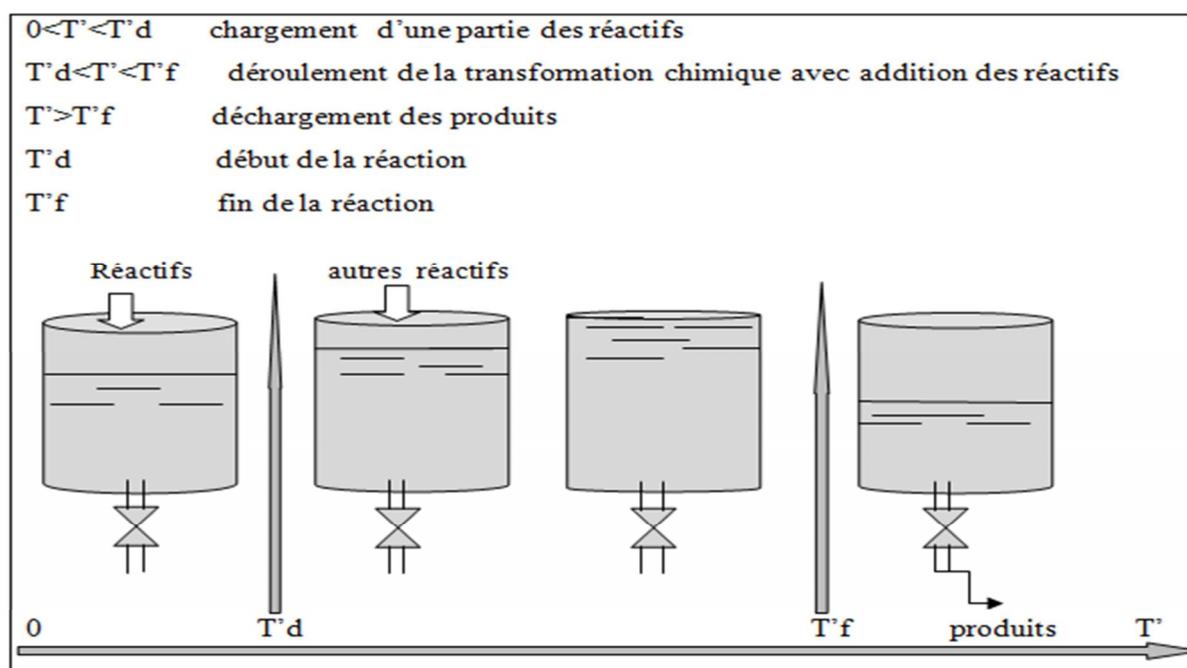


Figure 1-7 Opération semi-continu

1.3.3.3. Opération continue

Dans une opération continue, nous avons à l'intérieur du réacteur un cheminement des diverses phases, de leurs points d'entrée à leurs points de sortie. Cet écoulement interne peut revêtir divers formes, qui dépendent évidemment de la structure de l'appareillage.

On est ainsi amené à définir des types d'écoulement bien caractérisés, auxquels les cas rencontrés en pratique pourront être comparés et parfois identifiés. Ces types d'écoulement, peuvent être qualifiés de modèles idéaux, et qui sont de deux sortes.

- l'écoulement de type piston, tel que celui qui est réalisé lorsqu'on fait circuler à grande vitesse un fluide peu visqueux dans un tube ;
- l'écoulement à travers un récipient parfaitement agité.

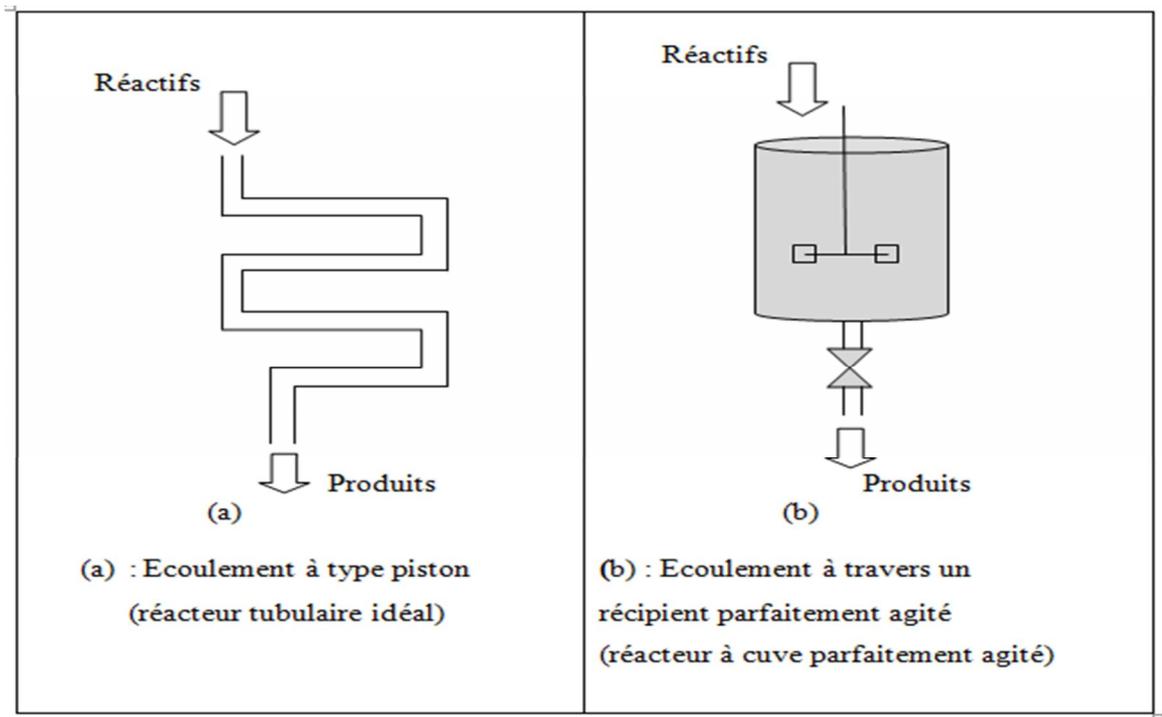


Figure 1-8 Opération continue

Le réacteur cuve à opération continue possède le même acabit que le précédent mis à part qu'il est muni d'entrée de réactifs et de sortie de produits, disposées de manière permanente, figure (1.10).

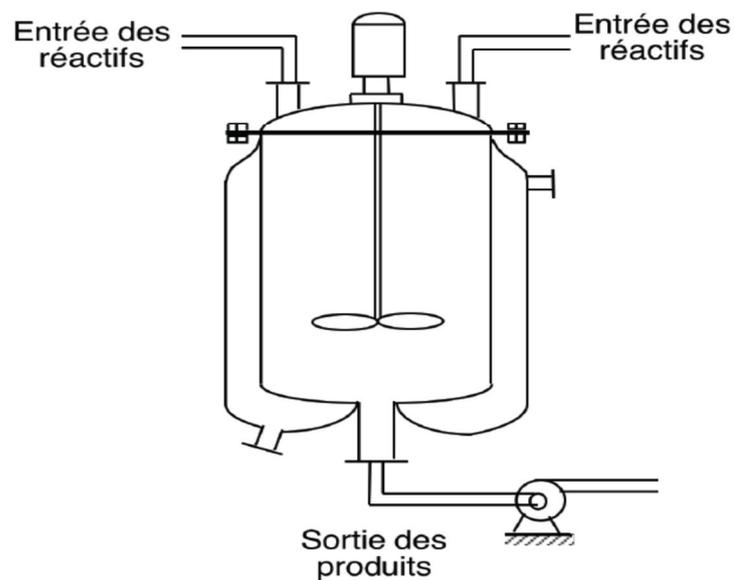


Figure 1-9 Réacteur cuve à opération continue

1.4. Principales caractéristiques d'une réaction chimique

Pour une réaction chimique, les principales caractéristiques à retenir sont :

Les espèces chimiques mises en jeu, les relations stœchiométriques et le chemin réactionnel. Pour chacune, la thermodynamique est en mesure de nous préciser les limites au-delà desquelles la transformation n'est pas possible (notion d'équilibre), ainsi que l'effet thermique qui est associé à la transformation (chaleur de réaction).

La nature des phases en présence durant la transformation chimique, avec indication de la localisation des réactions.

Le mode d'activation des réactions (le plus souvent thermique, catalytique ou par radiation). Dans le cas d'utilisation d'un catalyseur hétérogène, ce dernier aura déjà du être pris en compte lors de l'examen de la caractéristique précédente (phases en présence). Dans ce qui suit, nous ne considérons que les cas correspondant à une activation soit thermique, soit catalytique, l'activation par radiation (photochimique) n'étant pas prise en compte.

La cinétique formelle associée au chemin réactionnel, il s'agit d'expressions mathématiques traduisant les lois de vitesse des diverses réactions. [1]. [2]

1.5. Classification des réacteurs

Il est possible maintenant de dresser une classification des divers réacteurs rencontrés en pratique. Les deux caractéristiques principales retenues sont donc :

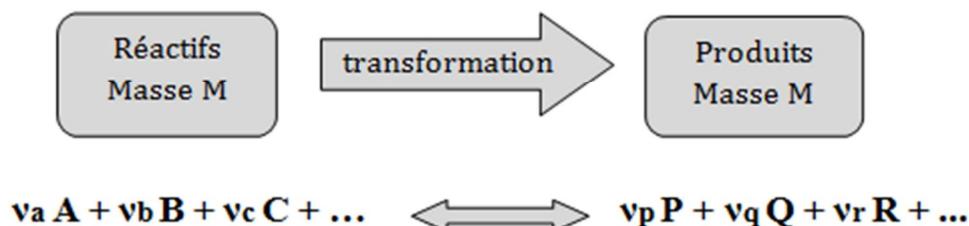
- La nature des phases en présence
- Le mode de fonctionnement du réacteur

1.6. Stœchiométrie

La stœchiométrie concerne tous les types de calculs qui sont en relation avec la réaction chimique. En effet, il faut comprendre que les variations de composition des différentes matières présentes dans un réacteur ne sont pas dues au hasard. [3]

Cas d'une réaction

Soit un système fermé à une phase homogène où se déroule la réaction générale suivante :



Cette équation exprime un bilan matériel global fixant la philosophie de la réaction chimique. Elle définit les substances en présence, réactifs ou produits et les quantités individuelles en nombre mises en jeu. Le bilan massique est toujours vérifié et constant quelque soit le niveau d'avancement de la réaction. En toute généralité, cette équation chimique se reformule mathématiquement sous la forme :

$$\sum v_i \cdot A_i = 0 \quad (1.1)$$

Où Les v_i sont les coefficients stœchiométriques de la réaction, ces coefficients comprennent leur signe, A_i est un des quelconques constituants de la réaction, Par ailleurs on peut caractériser l'avancement de la réaction par la variable ξ qu'est définie par :

$$\frac{n_i - n_{i_0}}{v_i} = \xi \quad (1.2)$$

n_{i_0} : Nombre initial de moles de l'espèce

n_i : Nombre de moles de l'espèce A

1.7. Formulation des bilans massique et enthalpie

Nous ne considérons ici que des systèmes monophasiques (homogènes).

Soit un élément de volume ΔV de phase réactionnelle figure (1.11), supposé homogène aussi bien en composition qu'en température ; pour tout espèce A_i contenue dans ce volume ΔV , il est possible d'écrire un bilan molaire sous la forme générale suivante : [1]. [2]

$$\frac{dn_i}{dt} = \sum_j v_{ij} \cdot \Delta V \quad (1.3)$$

$\frac{dn_i}{dt}$: est la vitesse d'accumulation de A_i dans le volume ΔV

v_{ij} , v_{ij} : sont respectivement les débits molaires entrant et sortant par convection et/ou diffusion.

\mathcal{R}_i : est la vitesse de génération de l'espèce A_i par réaction chimique, exprimée par unité de volume : $\mathcal{R}_i = \sum_j v_{ij} \cdot \Delta V$.

Pour un inerte, $\mathcal{R}_i = 0$

En ce qui concerne l'enthalpie, on peut écrire un bilan global sous la forme générale suivante :

$$\sum \frac{dn_i \cdot h_i}{dt} = \sum_j v_{ij} \cdot h_i \cdot \Delta V - \sum_k v_{ik} \cdot h_k \cdot \Delta V \quad (1.4)$$

Les Expressions dans les quelles les termes :

$\sum \frac{dn_i}{d}$: est la vitesse d'accumulation d'enthalpie dans le volume ΔV .

$\sum_{i,e} \dot{Q}_{i,e}, \sum_{i,e} \dot{Q}_i$: sont respectivement les débits enthalpie entrant et sortant dans le volume ΔV .

q : est la vitesse de transfert d'enthalpie venant de l'extérieur du volume ΔV Comptée positivement si elle fournie au système.

Élément de volume ΔV de phase réactionnelle contenant n_i moles de l'espèce A_i

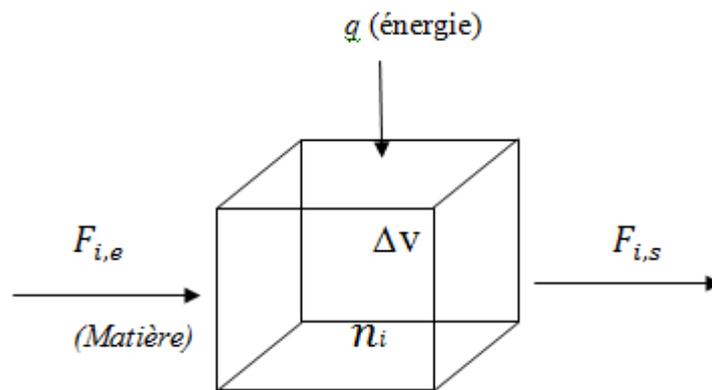


Figure 1-10 Schéma servant de base à l'établissement des bilans élémentaires de masse et d'enthalpie.

1.8. Application des expressions générales des bilans aux différents types de réacteurs idéalisés

1.8.1. Réacteur discontinu monophasique

Pour un tel réacteur, on admet que température et composition sont identiques en tout point de la phase réactionnelle. Les expressions (1.3) et (1.4) écrites pour un élément ΔV peuvent donc s'appliquer à l'ensemble du volume V de phase réactionnelle. [1]

De plus, les termes correspondant au débit entrant et sortant disparaissent, puisqu'il n'y a ni apport, ni soutirage de matière, figure (1.12).

De ce fait, les expressions de bilans deviennent :

- les bilans massiques :

$$\frac{dn_i}{d} = \dot{Q}_{i,e} - \dot{Q}_i + \dot{Q} \quad (1.5)$$

- Le bilan enthalpie:

$$\sum \frac{dn_i}{d} \cdot V \tag{1.6}$$

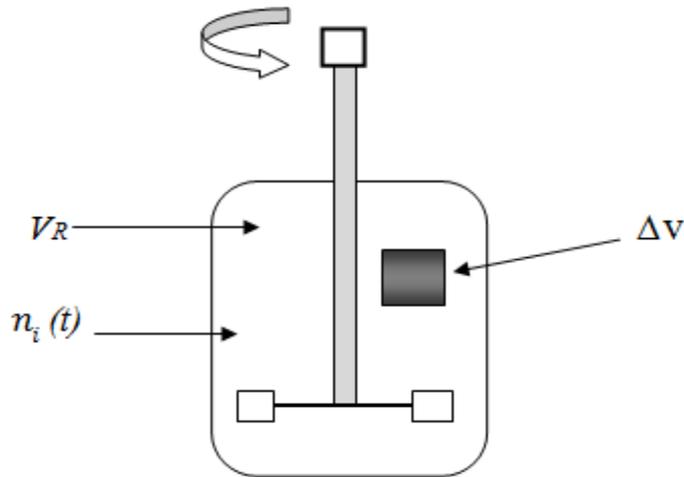


Figure 1-11 Représentation d'élément de volume dans le réacteur discontinu

1.8.2. Réacteur semi-continu monophasique

Dans ce cas, l'hypothèse d'homogénéité de la phase réactionnelle est encore valable. Par contre, les termes correspondant au débit entrant et sortant ne seront que partiellement conservés et seront généralement fonction du temps figure (1.13).

- en ce qui concerne les bilans massiques :

$$\frac{dn_i}{d} , \quad \text{?} \cdot V \tag{1.7}$$

- Le bilan enthalpie:

$$\sum \frac{dn_i}{d} \quad \sum , \quad \text{?} , \quad \cdot \Delta V \tag{1.8}$$

Les termes , sont non nuls seulement pour certains des composés A_i .

Dans le cas d'un soutirage au cours de l'opération, on écrira d'une manière analogue :

$$\frac{dn_i}{d} - , \quad \text{?} \cdot V \tag{1.9}$$

$$\sum \frac{dn_i}{dt} = \sum \nu_i \cdot R_i - \sum \nu_i \cdot \Delta V \cdot \dots \quad (1.10)$$

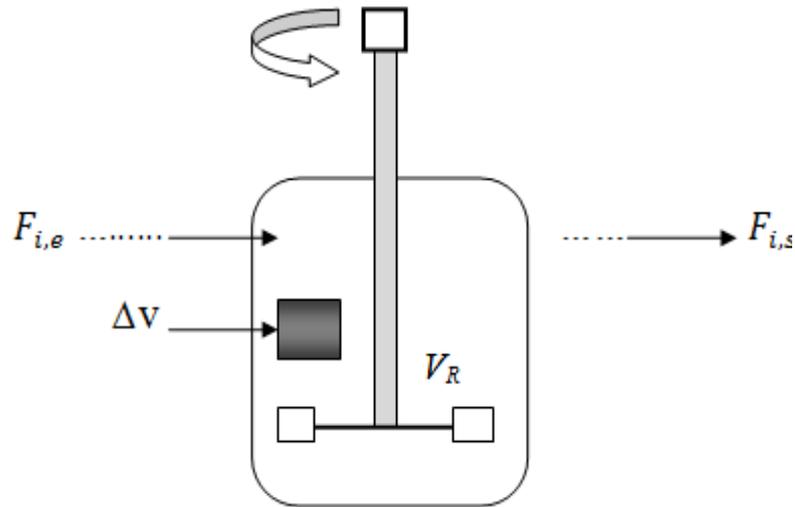


Figure 1-12 Représentation d'élément de volume dans le réacteur semi continu

1.8.3. Réacteur tubulaire à écoulement piston

Par définition, l'écoulement dans un réacteur de ce type est tel qu'un élément de fluide le traverse sans aucun mélange avec les éléments fluides qui le précèdent ou le suivent. Par ailleurs, tous éléments fluides sont supposés avoir la même vitesse linéaire, quelle que soit leur position radiale. Ainsi, le long d'un tel réacteur, la composition de la phase réactionnelle varie d'un point à un autre, alors que radialement on a une homogénéité des concentrations ; ceci est également vrai en ce qui concerne la température. L'élément ΔV à prendre en compte dans les équations (1.3) et (1.4) sera donc infinitésimal, figure (1.14).

- L'équation (1.3) s'écrit :

$$\frac{dn_i}{dt} = \nu_i \cdot R_i - \sum \nu_i \cdot \Delta V \cdot \dots \quad (1.11)$$

- L'équation (1.4) devient de façon analogue:

$$\sum \frac{dn_i}{dt} = \sum \nu_i \cdot R_i - \sum \nu_i \cdot \Delta V \cdot \dots \quad (1.12)$$

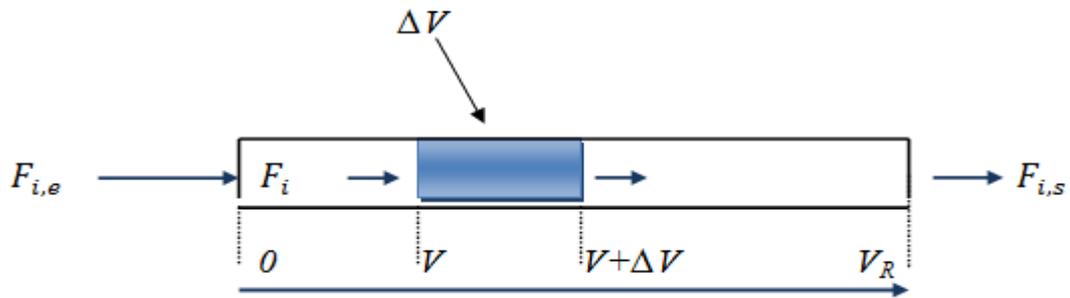


Figure 1-13 Représentation d'élément de volume dans le réacteur tubulaire

1.8.4. Réacteur continu parfaitement agité :

Dans ce cas les expressions générales (1.3) et (1.4) écrites pour un élément de volume ΔV , peuvent s'étendre à l'ensemble du volume V occupé par la phase réactionnelle, figure (1.15). Lorsque le régime stationnaire est établi, les termes transitoires disparaissent et on obtient :

$$F_{i,e} - F_{i,s} - \sum_i r_i \cdot \Delta V = 0 \tag{1.13}$$

$$\sum_i F_{i,e} \cdot C_{i,e} - \sum_i F_{i,s} \cdot C_{i,s} - \sum_i r_i \cdot \Delta V = 0 \tag{1.14}$$

Dès l'instant où l'on connaît la température de fonctionnement du réacteur, on peut calculer son volume à partir de la relation (1.13):

$$V = \frac{F_{i,e} - F_{i,s}}{\sum_i r_i} \tag{1.15}$$

Les grandeurs $F_{i,e}$ et $\sum_i r_i$, constituent dans ce cas les conditions limites du problème à traiter, puisqu'elles décrivent en fait l'alimentation du réacteur, aussi bien en ce qui concerne le débit que pour la composition et température.

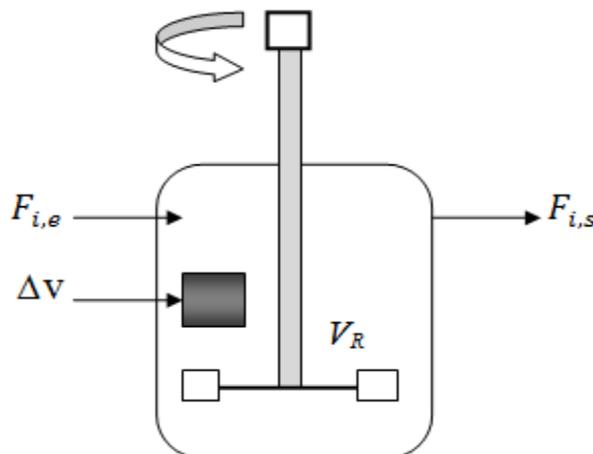


Figure 1-14 Représentation d'élément de volume dans le réacteur parfaitement agité

1.9. Comparaison des divers types de réacteurs

Dans les paragraphes précédent, nous avons présenté quatre réacteurs et analysé leur comportement, nous nous limitons à des systèmes réactionnels monophasiques.

Il est intéressant de comparer ces quatre types de réacteurs, a fin de voir leurs avantages et leur inconvénients.

Cette comparaison sera faite sous divers aspects, chacun a son importance propre par rapport à l'objectif visé.

Le choix entre le réacteur continu et le réacteur discontinu sera souvent lié à la capacité de production. On peut dire, en première approximation, que pour de fortes capacités, les systèmes continus seront généralement préférés. Par contre, pour fabriquer des quantités relativement faibles de produit, on utilise un réacteur discontinu a fin de mettre en jeu des étapes successives.

On peut dire que l'avantage principal des systèmes continus se situe au niveau des fortes capacités, alors que celui du réacteur discontinu se trouve dans sa flexibilité et son adaptabilité à divers types de réaction. Il est certain que des réacteurs discontinu ou continu de type parfaitement agité, peuvent travailler à température ou à forte pression. [1]

1.10. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté les réacteurs chimiques de façon générale. A partir de montre quelques définitions, différent types, et leurs classifications. Ainsi représente les différents types des réactions chimiques avec montré que chaque réaction possède un réacteur spécial. Et d'autre part on à expliqué les Applications des expressions générales des bilans aux différents types de réacteurs.

Chapitre 02

MODELISATION DES REACTEURS CHIMIQUES

2.1. Introduction

La modélisation permet d'établir un modèle de procédés à partir des lois fondamentales de la physique et de la chimie telles que la conservation de la masse, le premier principe de la thermodynamique, les équilibre entre phases, les lois de transfert... dans leur formulation la plus générale, ceux-ci s'écrivent :

$$(\text{ce qui rentre}) + (\text{ce qui se crée}) = (\text{ce qui sort}) + (\text{ce qui s'accumule}).$$

Parmi les divers types de réacteurs présenté dans le premier chapitre, on à choisi deux réacteurs, les plus utilisant dans les réactions chimiques, le premier est le réacteur continu parfaitement agité, et le second réacteur discontinu fermé.

Nous allons développer la modélisation de ces éléments par l'outil MATLAB/SIMULINK à partir des équations différentielles. Le système à modéliser possède un comportement non linéaire du principalement au couplage des différent phénomènes de natures divers.

2.2. Relation entre l'automatique et les systèmes de régulation dans le génie des procédés

La recherche bibliographique nous a permet de connaitre la relation ou bien la place de l'automatique et les systèmes de régulation, dans le génie des procédés. Si l'on considère que l'automatique est une réflexion sur la science des systèmes, le génie des procédés nécessite de modéliser des systèmes divers et fournit des méthodes de modélisation, figure (2.01).

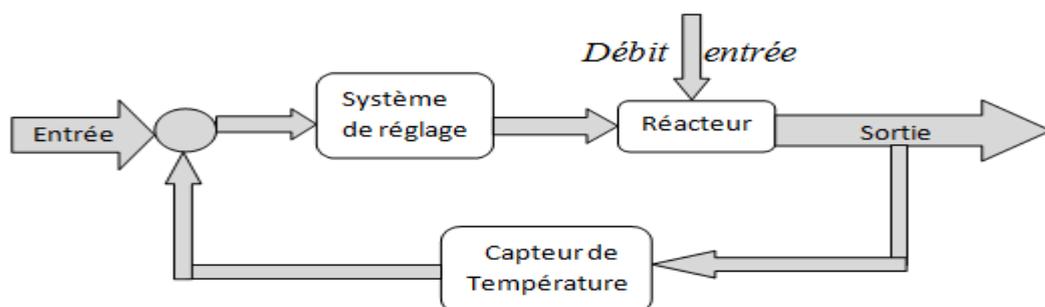


Figure 2- 13 Relation entre l'automatique et les systèmes de régulation

Les équations décrivant une opération unitaire donnée ou unité de production peuvent être classées selon leur type mathématique et ressortent des lors de méthodologies générales. Selon l'usage auquel on destine les modèles des procédés et le degré d'investissement, on peut préférer des modèles de représentation comme les fonctions de transfert continues ou discrètes provenant d'identifications entrée _ sortie qui relèvent de l'automatique.

Ce dernier intervient donc fréquemment dans le monde du génie des procédés. Il est toute fois souhaitable que cela se fasse en coopération avec de véritables spécialistes du génie de procédés, afin d'utiliser au mieux toute la connaissance théorique ou pratiques des procédés eux-mêmes.

Il est clair que tous les procédés ne sont pas couverts, ce qui est totalement impossible et non nécessaire, car il est possible de travailler par analogie et que toutes les méthodes de l'automatique ne sont pas représentées. [4]

2.2.1. Grandeurs mesurées et régulées

Les grandeurs les plus souvent mesurées sont la pression, le niveau, le débit, la température, la concentration, etc....

2.2.2. Capteur

Un capteur est un organe de prélèvement d'information qui élabore à partir d'une grandeur physique, une autre grandeur physique de nature différente (pneumatique ou électrique). Cette grandeur représentative de la grandeur prélevée est utilisable à des fins de mesure ou de commande. L'un des capteurs les plus utilisées et qui nous intéresse pour notre étude c'est les thermocouples

2.3. Généralité sur la modélisation

La modélisation est une technique nécessaire à l'étude, la réalisation et le contrôle des systèmes ou des unités industrielles, cette technique peut prendre de différentes formes telles que la modélisation physique, mathématique ou graphique. La complexité des systèmes modernes à orienté la recherche vers l'utilisation des meilleures méthodes afin d'obtenir le modèle le plus proche (ou fiable) du système réel.

Définir la modélisation en génie des procédés est une tâche délicate tant elle recouvre d'actions et d'objectifs divers. On pourrait néanmoins lui donner la définition synthétique suivante : La modélisation est une démarche qui permet, à partir de faits expérimentaux, de construire un outil mathématique reliant les sorties d'un système à ses entrées.

L'ensemble d'équations ou la représentation graphique de ces systèmes et qui doit aussi prédire leur comportement futur constitue **un modèle**. [4].

2.3.1. Processus

Un processus est caractérisé par

- Une ou plusieurs grandeurs de sortie, mesurables, qui constituent le résultat du processus,
- Une ou plusieurs grandeurs d'entrée (ou facteurs), qui peuvent être de deux types :
 - des entrées sur lesquelles il est possible d'agir (entrées de commande),
 - des entrées sur lesquelles il n'est pas possible d'agir (perturbations).

Ces dernières peuvent être aléatoires ou déterministes, mesurables ou non mesurables. Les processus peuvent être de toutes natures : physique, chimique, biologique, etc.

2.3.2. Modèles

Un modèle est une représentation mathématique, physique ou graphique susceptible de se comporter comme le système physique si les deux sont soumis à la même excitation d'entrée.

Un modèle est caractérisé par son domaine de validité, c'est-à-dire par le domaine de l'espace des entrées dans lequel l'accord entre les valeurs des sorties du processus calculées par le modèle, et leurs valeurs mesurées, est considéré comme satisfaisant compte tenu de l'utilisation que l'on fait du modèle.

La modélisation s'effectue selon le degré de connaissance qui doit être le plus élevé possible chez le concepteur, mais il est nécessaire en général de faire des hypothèses simplificatrices afin de limiter la complexité du modèle.

Ceci nous conduit à classer les modèles en deux types:

- Modèles de comportement ou de représentation.
- Modèles de connaissance.

2.3.3. But d'une modélisation

Un modèle peut être utilisé soit

- Pour simuler un processus : à des fins pédagogiques, de détection d'anomalies de fonctionnement, de diagnostic de pannes, de conception assistée par ordinateur, etc.,
- Pour effectuer la synthèse d'une loi de commande, ou pour être incorporé dans un dispositif de commande

2.4. Présentation de l'environnement MATLAB/SIMULINK

2.4.1. MATLAB

Matlab, est un environnement puissant destiné au calcul scientifique. Il intègre le calcul matriciel et l'analyse numérique dans ses fonctions de base. Il est devenu un outil incontournable pour l'ingénierie et la recherche scientifique, par sa simplicité d'utilisation et sa puissance de calcul et de visualisation.

En plus du noyau Matlab, il existe de nombreuses boites à outil dont chacune est dédiée à un domaine particulier.

La programmation orientée objets, les structures et les cellules sont des fonctionnalités importantes qui permettent à Matlab de devenir un véritable langage de programmation.

2.4.2. SIMULINK

Simulink (**Simulation and Link**), est une interface graphique qui facilite l'analyse de système dans le domaine temporel. Cette approche est, en effet, facilitée, dans le sens où, les systèmes ne sont plus décrits par des lignes de code Matlab mais simplement définis à partir d'un bloc diagramme dont tous les éléments sont prédéfinis dans des bibliothèques de blocs élémentaires qu'il suffit d'assembler. Lorsque le schéma-bloc du système que l'on étudie est représenté sous simulink, il est possible d'analyser sa réponse temporelle (à des entrées aussi diverses qu'un échelon, une rampe, un signal rectangulaire, un sinus, un signal aléatoire,..) en lançant une simulation. Pour des systèmes intégrant des non linéarités importantes, il est possible de choisir, pour la simulation, parmi différentes méthodes d'intégration numérique (par exemple, des méthodes comme Euler ou Runge Kutta sont disponibles).

Les résultats d'une simulation sont, soit visibles en temps réel sur une sorte d'oscilloscope dans l'environnement Simulink, soit disponibles à la fin de la simulation dans l'environnement Matlab. On peut, dans ce dernier cas, les tracer dans une fenêtre graphique Matlab en utilisant tous les outils graphiques que l'on a vus. [5]. [6]

2.5. Modélisation des réacteurs chimique

Le point de départ pour toute modélisation en génie des procédés c'est le bilan de matière exprimé en réactifs ou produit. Si le réacteur avec double enveloppe est seul alors on dit que La modélisation est en boucle ouvert (non commandé), la figure (2.02) montre ce type de modélisation.

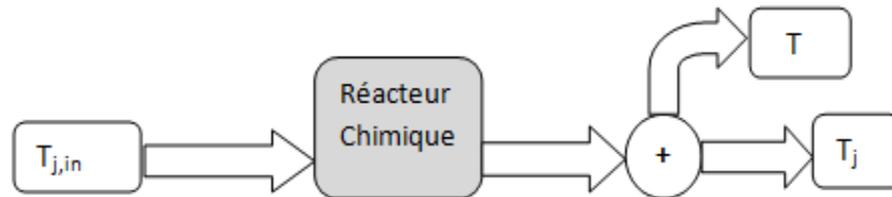


Figure 2- 14 Réacteur chimique en boucle ouvert

Par contre le réacteur avec double enveloppe et associer des accessoires (pompe, vanne, échangeur de chaleur), alors on dit que la modélisation en boucle fermée (commandée), la figure (2.03) montre ce type de modélisation.

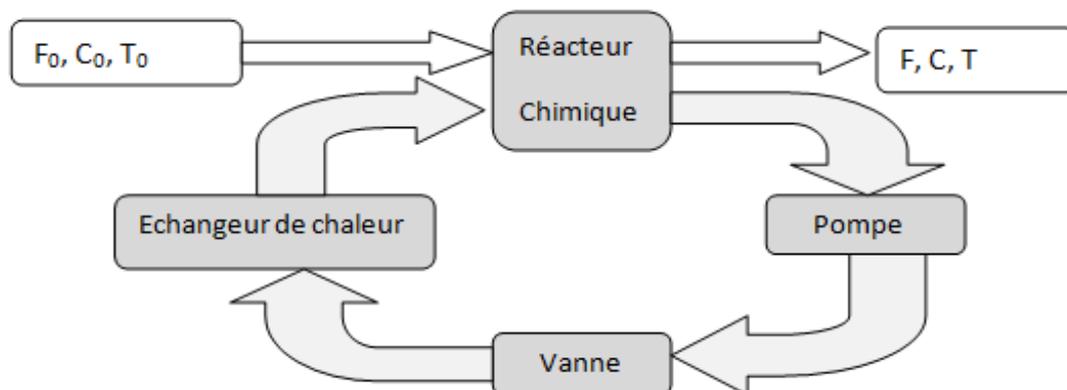


Figure 2- 15 Réacteur chimique en boucle fermée

2.5.1. Réacteur continu (parfaitement agité)

L'exemple retenu est classique du point de vue des bilans de matière et d'énergie décrivant le comportement dynamique d'un réacteur chimique. Il concerne un réacteur continu dans lequel se déroule une réaction: $A \longrightarrow B$.

Le modèle non linéaire dans l'espace d'état comporte trois équations différentielles décrivant l'évolution des trois états (C_A concentration en A, T température du réacteur, T_j température de la double enveloppe) dont un seul est mesuré (la température du réacteur). [7]

2.5.1.1. Schéma d'un réacteur chimique continu

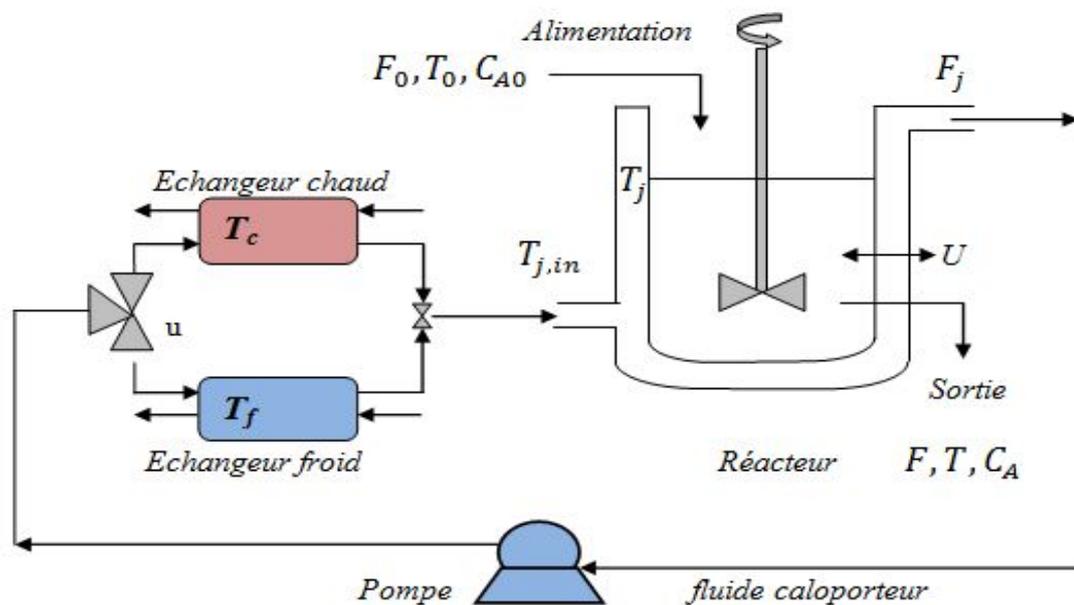


Figure 2- 16 Schéma du Réacteur continu chimique avec double enveloppe

Les hypothèses qui ont été utilisées pour la modélisation sont les suivantes :

- Réacteur continu avec double enveloppe
- Phase homogène.
- Volume réactionnel constant.
- Les échanges thermiques sont régis par un coefficient global d'échange U
- vanne à trois voies.
- Echangeur chaud.
- Echangeur froid.
- Pompe.

2.5.1.2. Principe de fonction

Le réacteur chimique continu parfaitement agité (entrée indiquée « 0 », sortie ayant les propriétés du contenu du réacteur). Il est le siège d'une réaction ($A \longrightarrow B$) d'ordre n , fournissant une chaleur de réacteur ΔH . Le réacteur est entouré par une double enveloppe indiquée « j » de volume constant V traversée par un fluide de débit constant avec une température $T_{,in}$ variable.

Le courant entrant dans la double enveloppe résulte du mélange de deux courants, l'un traversant un échangeur de chaleur chaud (température T_c), l'autre traversant un échangeur de chaleur froid (température T). La proportion de fluide à travers ces échangeurs dépend de la position (u) d'une vanne à trois voies. Ainsi la température d'entrée dans la double enveloppe est une fonction pondérée des deux températures des échangeurs de chaleur.

Un régulateur proportionnel à rétroaction régule le niveau dans le réacteur autour d'une consigne V_c . [7]. [8]

2.5.1.3. Les équations caractéristiques

- Température d'entrée dans la double enveloppe :

$$T_{,in} = T_c + (1 - \alpha) T \quad (2.01)$$

- Bilan matière du réacteur :

$$\frac{dn_A}{dt} = - \quad (2.02)$$

- Bilan en constituant A :

$$\dot{n}_A = \alpha_i \cdot V \cdot \dot{n}_A = dn_A/dt \quad (2.03)$$

Pour : $\dot{n}_A = \alpha_i \cdot V$; $\alpha_i = \frac{n}{A}$; $\dot{n}_A = \frac{dn_A}{dt}$

On obtient :

$$\dot{n}_A = \frac{dn_A}{dt} = \frac{n}{A} \cdot V \cdot \dot{n}_A = dn_A/dt \quad (2.04)$$

Et finalement:

$$\frac{dn_A}{dt} = \frac{n}{A} \cdot V \cdot \dot{n}_A = dn_A/dt \quad (2.05)$$

- Bilan d'énergie sur le réacteur :

(U.A. ΔT): est un terme considéré comme entrée si le réacteur avec double enveloppe.

$$\frac{dT}{dt} = \frac{n}{A} \Delta T - \frac{A}{V} (T - T_c) \quad (2.06)$$

Et finalement:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{n}{V} (T_c - T) - \frac{A}{V} (T - T_c) \quad (2.07)$$

- Bilan d'énergie sur la double enveloppe :

$$\frac{dT_{in}}{dt} = \frac{A}{V} (T - T_{in}) - \frac{A}{V} (T - T_c) \quad (2.08)$$

Et finalement:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{A}{V} (T_{in} - T) - \frac{A}{V} (T - T_c) \quad (2.09)$$

- Régulation Proportionnelle de niveau dans le réacteur :

$$\delta = V_c - V \quad (2.10)$$

Pour aboutir à une expression simple des équations précédentes, on suppose l'ordre de la réaction (n=1).

A partir des équations différentielles précédentes, le vecteur d'état peut être écrit sous la forme :

$$X = [X_1; X_2; X_3; X_4]^T$$

Et le modèle dans l'espace d'état s'écrit :

$$\begin{cases} \dot{X}_1 = F/V \cdot C - X_1 - k \cdot e^{-\frac{X_1}{\rho \cdot C}} \cdot X_1 \\ \dot{X}_2 = F/V \cdot T - X_2 - \Delta H \cdot k \cdot e^{-\frac{X_1}{\rho \cdot C}} \cdot \frac{X_1}{\rho \cdot C} - U \cdot A \cdot (X_2 - X_3) / \rho \cdot X \cdot C \\ \dot{X}_3 = F/V \cdot T_c - X_3 - U \cdot A \cdot (X_2 - X_3) / \rho \cdot V \cdot C \\ \dot{X}_4 = F - F \\ Y = X \end{cases} \quad (2.11)$$

$$Y = X \quad (2.12)$$

2.5.1.4. Obtention de la loi de commande

En remplaçant la température d'entrée dans la double enveloppe T_{in} par son expression en fonction de la position u de la vanne, on exprime le modèle dynamique (2.11) du réacteur chimique comme un système non linéaire, mono variable par rapport à l'entrée et à la sortie, et affine par rapport à la commande : [7]

$$\left\{ \begin{array}{l} \dots \\ \dots \end{array} \right. \quad (2.13)$$

Avec les champs des vecteurs suivants :

$$f(x) = \begin{pmatrix} F/V \cdot C - X_1 - k \cdot e^{-\dots} \cdot X_1 \\ F/V \cdot T - X_2 - \Delta H \cdot k \cdot e^{-\dots} \cdot \frac{1}{\rho} - A - 3 / \dots \\ \dots \\ \dots \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

$$g(x) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ V \cdot T_c - T \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.15)$$

Et le scalaire : $h(x) = x_2$ (2.16)

Il faut d'abord déterminer le degré relatif de ce système. Pour cela, les dérivées de « lie » suivantes sont calculées :

- La dérivée de « lie » de $h(x)$ dans la direction du champ de vecteur f :

$$L_f h(x) = \dots f(x) = f_2(x)$$

$$F/V \cdot T - X_2 - \Delta H \cdot k \cdot e^{-\dots} \cdot \frac{1}{\rho} - A - 3 / \dots \quad (2.17)$$

- La dérivée de « lie » de $h(x)$ dans la direction du champ de vecteur g :

$$h(x) = \dots h(x) \quad (2.18)$$

Ce qui implique que le degré relatif du système est supérieur à 1.

- La dérivée de « lie » de \dots dans la direction du champ de vecteur g :

$$\dots / \dots \cdot A / V \cdot T_c - T \quad (2.19)$$

Cette dérivée est toujours non nulle, puisque les températures caractéristiques des échangeurs chaud et froid sont différentes.

Le degré relatif à la sortie $h(x)=x_2$ du système non linéaire (2.11) est donc égal à 2.

A fin d'éliminer l'erreur statique, un régulateur proportionnel intégral est introduit tel que l'entrée externe soit égal à :

$$V = c_c - 1/c - d \tag{2.20}$$

Où c_c est la consigne, et c est la sortie commandée.

Le système complet est représenté par la figure (2.05). On déduit la forme générale de la loi de retour d'état qui linéarise le comportement entrée-sortie du système en boucle fermée :

$$V = \dots \tag{2.21}$$

Où \dots , \dots sont des paramètres scalaires constants, il faut calculer \dots qui est présentée ici sous une forme abrégée, et qui peut être facilement explicitée :

$$\dots = \sum_i \dots \tag{2.22}$$

Il suffit alors de déterminer les paramètres \dots , \dots , \dots de telle manière que la fonction de transfert en boucle fermée soit égale à :

$$\dots = \frac{\dots}{\dots} \tag{2.23}$$

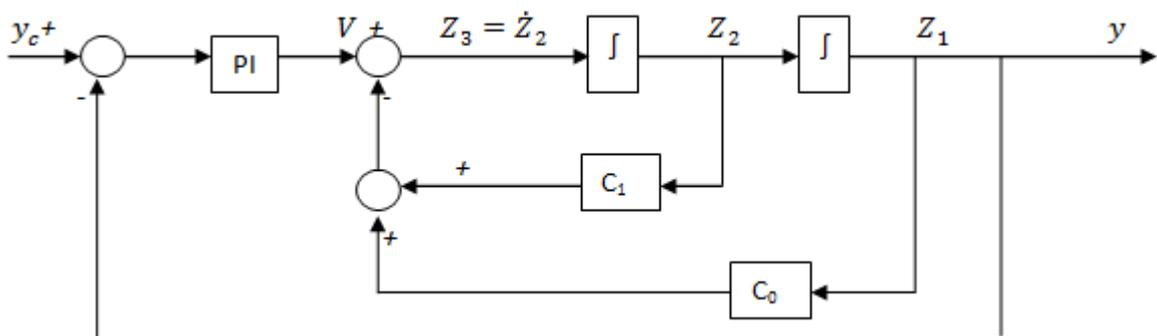


Figure 2- 17 Commande non linéaire géométrique du réacteur chimique avec placement des pôles.

2.5.1.5. Les Schémas blocs des différents accessoires de réacteur

a. Schéma bloc de La pompe

- Modèle hydraulique : [6]

Le débit de l'eau refoulée par la pompe est donné par :

$$\dot{m} = \frac{1}{K_1} \left(\frac{P_1 - P_2}{K_2} \right)^{0.972} \quad (2.24)$$

Avec

- P_1, P_2 : sont respectivement les pressions en amont et en aval de la pompe.
- K_1, K_2 : des paramètres caractéristiques de la pompe déterminés expérimentalement.

$$K_1 = -8,33 * 10^{-1} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1} \text{ Pa}^{-1}$$

$$K_2 = 0.972 \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$$

K_1 : Étant négatif puisque la pompe fournit dans ce cas de l'énergie

- Modèle thermique :

L'équation du flux d'enthalpie est :

$$\dot{A} = 0.042 \dot{m} T_A \quad (2.25)$$

Avec :

T_{AL} : est la température d'alimentation

0.042 J/Kg. °C : est la chaleur spécifique de l'eau est pratiquement constant.

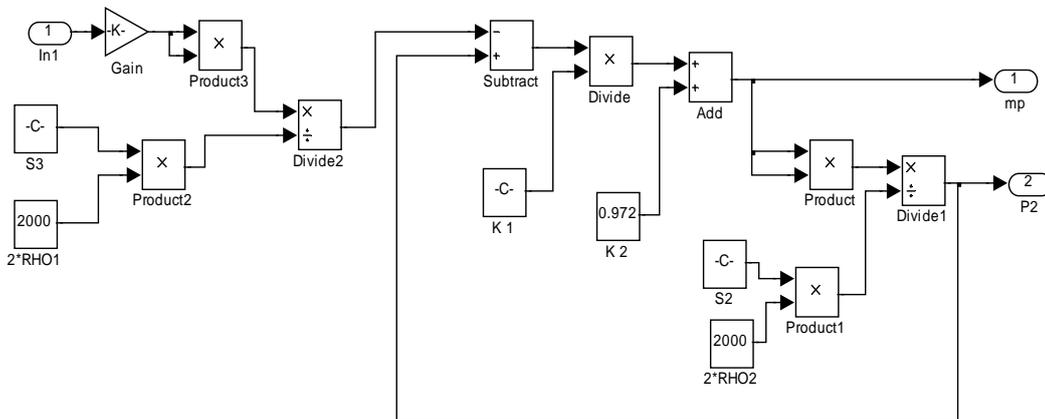


Figure 2- 18 Schémas blocs de La pompe

b. Schéma bloc de la vanne de régulation

Le débit massique qui circule dans la vanne de commande est : [6]

$$\dot{m}_c = \frac{\psi * (P_1 - P_2) * T_1}{T_1} \quad (2.26)$$

ψ : désigne le coefficient de pertes de charges, il est fonction de l'ouverture $uv1$, ce coefficients sont une fonction non linéaires de la position u de la vanne.

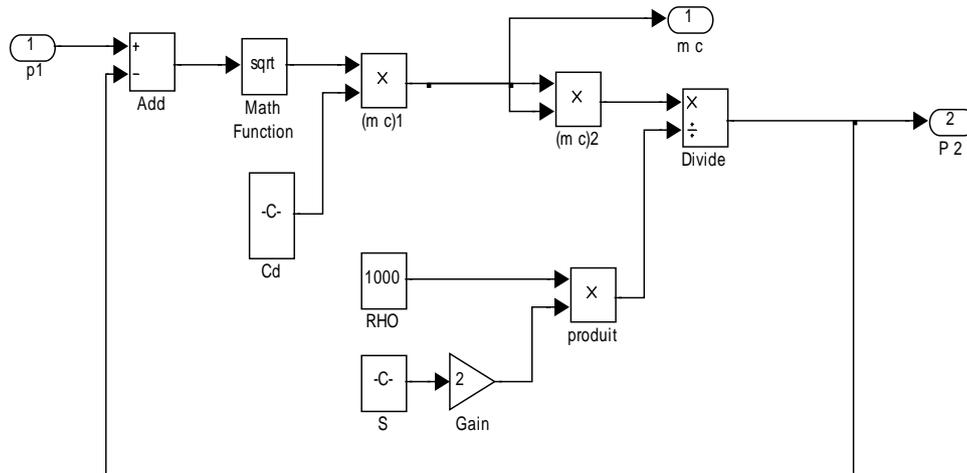


Figure 2- 19 Schémas blocs de la vanne de régulation

c. Schéma bloc de l'échangeur de chaleur

Le flux thermique est : [09]

$$Q = k \cdot S \cdot (T_{ec} - T_e) \tag{2.27}$$

S : Surface de la paroi

T_{ec}, T_e : Représente la température entrée chaud et froid de l'échangeur de chaleur

k : Coefficient d'échange global

$$k = \frac{1}{\frac{1}{\lambda} + \frac{1}{h_c} + \frac{1}{h_f}} \tag{2.28}$$

$\frac{1}{h_c}$: Résistance thermique chaud

$\frac{1}{h_f}$: Résistance thermique froid

$\frac{1}{\lambda}$: Résistance thermique de conduction

La température de la sortie d'un fluide chaud :

$$T_c = T_{ec} - \frac{Q}{h_c \cdot S} \tag{2.29}$$

La température de la sortie d'un fluide froid:

$$T = T_e \frac{\dot{m}_c}{\dot{m}_c + \dot{m}_f} \quad (2.30)$$

\dot{m}_c : Débit massique chaud

\dot{m}_f : Débit massique froid

C_p : Capacité thermique massique (chaleur massique). [11]

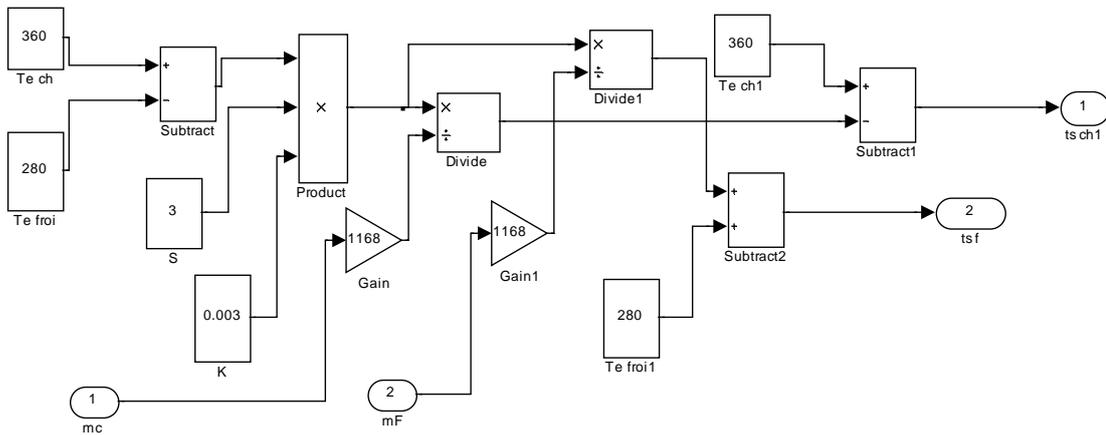


Figure 2- 20 Schémas blocs de l'échangeur de chaleur

D'autre part pour ce travail, il y a un essai (l'étude expérimentale de W.L.luyben) différent par rapport à l'étude précédent. Elle fait une régulation proportionnelle de niveau dans la double enveloppe. Figure (2.09)

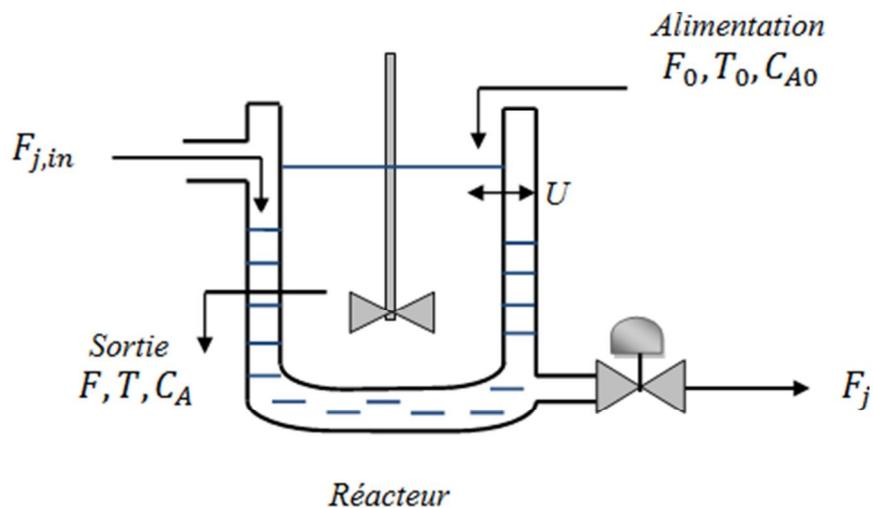


Figure 2- 21 Régulation proportionnelle de niveau dans la double enveloppe

2.5.1.6. Les équations caractéristiques

- Régulation Proportionnelle de niveau dans la double enveloppe :

$$\delta U = K_p (T_1 - T) \quad (2.31)$$

Avec :

T_1 : température initiale de réacteur

T : température de réacteur

- Régulation Proportionnelle de niveau dans le réacteur :

$$\delta = \dots \cdot V_c - V \quad (2.32)$$

- Bilan matière du réacteur :

$$\frac{d}{dt} = \dots \quad (2.33)$$

- Bilan en constituant A :

$$d \frac{A}{dt} = \dots / V \cdot A - A - \dots \cdot \frac{n}{A} \quad (2.34)$$

- Bilan d'énergie sur le réacteur :

$$\frac{dT}{dt} = \dots / V \cdot T - T - \Delta \dots \cdot \frac{n}{A} / \dots - \dots \cdot A \cdot T - T / \dots \cdot V. \quad (2.35)$$

- Bilan d'énergie sur la double enveloppe :

$$\frac{dT}{dt} = \dots / V \cdot T_{,in} - T \dots \cdot A \cdot T - T / \dots \cdot V. \quad (2.36)$$

A partir des équations différentielles précédentes, le vecteur d'état peut être écrit sous la forme :

$$X = \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \\ X_4 \end{bmatrix}; \quad X_1 = C_{A0} - X_2; \quad X_2 = T; \quad X_3 = T; \quad X_4 = V$$

Et le modèle dans l'espace d'état s'écrit :

$$\begin{cases} \dot{X}_1 = F_0/X_4 \cdot C_{A0} - X_1 - k_0 \cdot e^{\frac{E}{R \cdot X_2}} \cdot X_1 \\ \dot{X}_2 = F_0/X_4 \cdot T_0 - X_2 - \Delta H \cdot k_0 \cdot e^{\frac{E}{R \cdot X_2}} \cdot \frac{X_1}{\rho \cdot C_p} - U \cdot A \cdot X_2 - X_3 / \rho \cdot X_4 \cdot C_p \\ \dot{X}_3 = F_j/V_j \cdot T_{j,in} - X_3 - U \cdot A \cdot X_2 - X_3 / \rho_j \cdot V_j \cdot C_{pj} \\ \dot{X}_4 = F_0 - F \end{cases} \quad (2.37)$$

$$Y = X_2 \quad (2.38)$$

A partir du modèle dans l'espace d'état on peut obtenir le schéma bloc de ce réacteur, représenté par la figure (2.10).

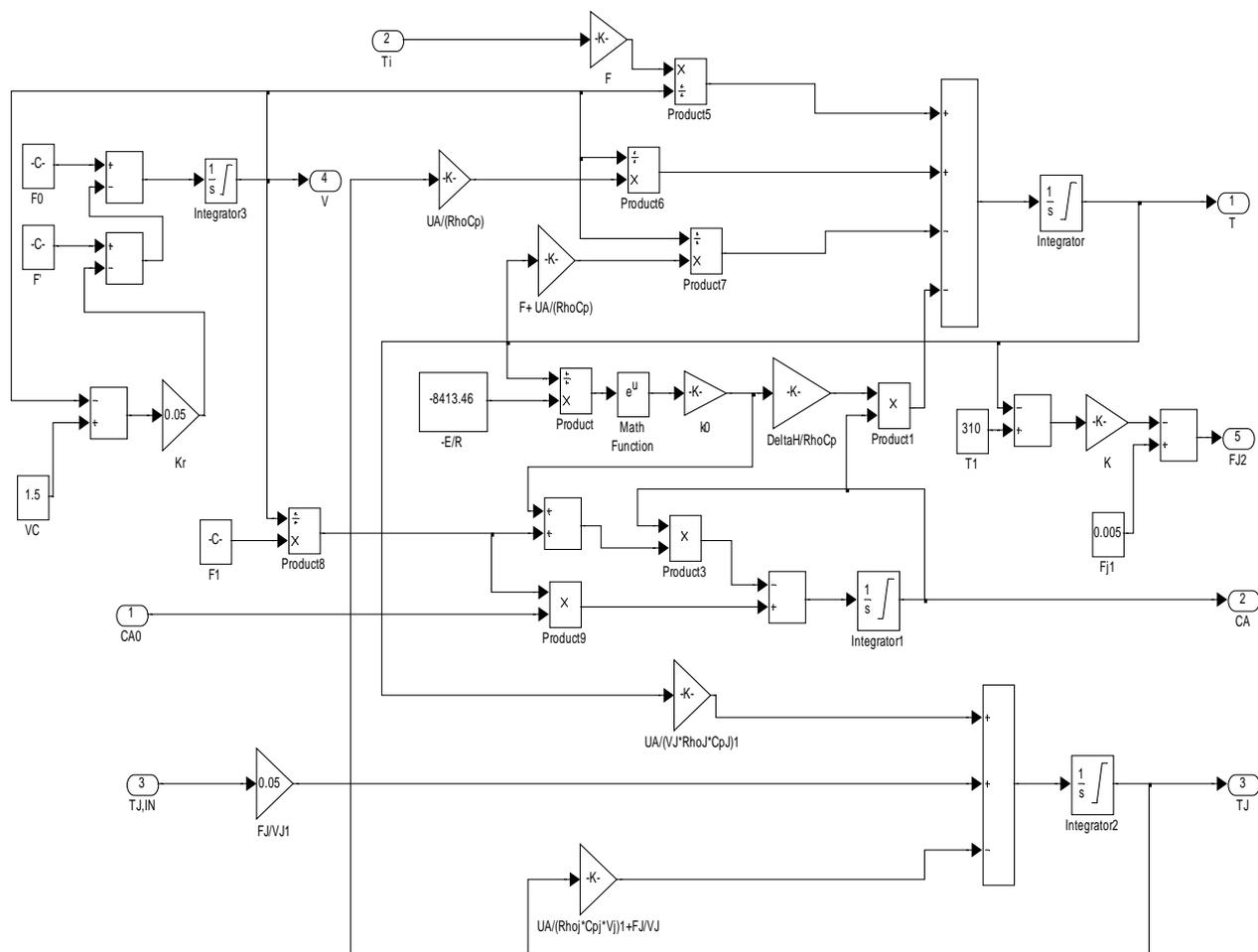


Figure 2- 22 Schéma bloc de réacteur continu

Tableau 2- 4 Caractéristiques de l'échangeur de chaleur

La température d'entrée d'un fluide chaud.	360K
La température d'entrée d'un fluide froid.	280K
La chaleur massique de la paroi.	1168J/Kg.k
La conductivité thermique de la paroi.	$\lambda=50\text{W/m.k}$
La résistance thermique de la paroi.	0.009K/W
La résistance thermique entre liquide chaud et la paroi.	0.05K/W
La résistance thermique entre la paroi et liquide froid.	0.15K/W

Tableau 2- 5 Caractéristiques du réacteur continu

Débit d'alimentation	$F_0=3*10^{-4}.m^3.s^{-1}$
Concentration de l'alimentation en A	$C_{A0}=3900.mol.m^{-3}$
Température du courant d'alimentation	$T_0=295 K$
Consigne de volume du réacteur	$V=1,5 m^3$
Constante cinétique	$K_0=2*10^7 s^{-1}$
Energie d'activation d'Arrhenius	$E=7*10^4. J.mol^{-1}$
Chaleur de réaction	$\Delta H=-7*10^4. J.mol^{-1}$
Masse volumique du contenu	$\rho=1000 kg.m^{-3}$
Capacité calorifique du contenu	$C_p=3000jkg^{-1}k^{-1}$
Température de l'échangeur froid	$T_f=280 K$
Température de l'échangeur chaud	$T_c=360 K$
Débit de fluide caloporteur	$F_j=5*10^{-2}m^3s^{-1}$
Volume de la double enveloppe	$V_j=0.1m^3$
Coefficient de transfert de chaleur entre la double enveloppe et le contenu du réacteur	$U=900 W.m^{-2}k^{-1}$
Surface de transfert de chaleur	$A=20 m^2$
masse volumique du fluide caloporteur	$\rho_j=1000 kg.m^{-3}$
capacité calorifique du fluide caloporteur	$C_{pj}=4200jkg^{-1}k^{-1}$
gain proportionnel du régulateur de niveau	$K_r=0.05s^{-1}$

2.5.2. Réacteur discontinu (fermé)

2.5.2.1. Schéma du réacteur chimique

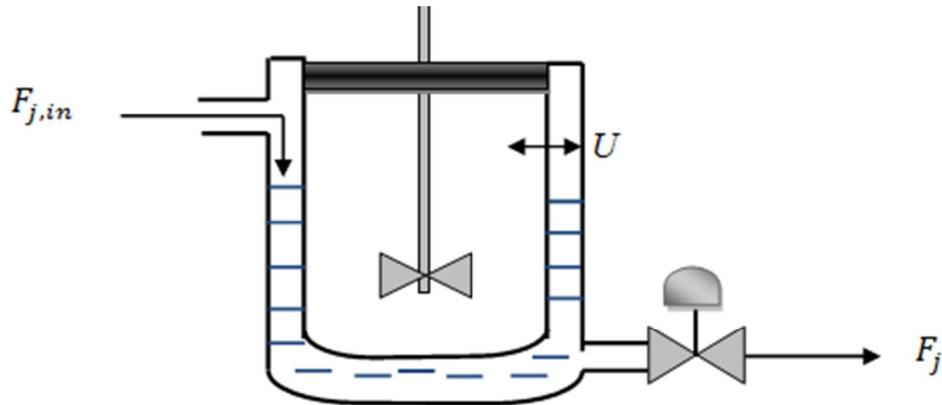


Figure 2- 23 Schéma du réacteur discontinu

2.5.2.2. Principe de fonction

Le réacteur chimique discontinu, Il est le siège d'une réaction ($A \longrightarrow B$), l'entrée et la sortie considérée comme nul, l'équation de bilan de matière il devient :

$$(ce\ que\ se\ crée) = (ce\ que\ s'accumule)$$

Fournissant une chaleur de réacteur ΔH . Le réacteur est entouré par une double enveloppe indiquée « j » de volume constant V traversée par un fluide de débit constant avec une température T_{in} constant.

2.5.2.3. Les équations caractéristiques

- Bilan en constituant A

$$d n_A / dt = - r_A V \tag{2.39}$$

- Bilan d'énergie sur le réacteur :

$$d T / dt = \Delta H r_A / V + (T_{in} - T) / \tau \tag{2.40}$$

- Bilan d'énergie sur la double enveloppe :

$$d T_j / dt = (T_{in} - T_j) / \tau_j + U A (T - T_j) / V \tag{2.41}$$

- Régulation Proportionnelle de niveau dans la double enveloppe :

$$\delta = T_1 - T \tag{2.42}$$

Pour aboutir à une expression simple des équations précédentes, on suppose l'ordre de la réaction (n=1).

A partir des équations différentielles précédentes, le vecteur d'état peut être écrit sous la forme :

$$X = \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \end{bmatrix} ; \quad A = \begin{bmatrix} -k \\ \Delta H \cdot k \\ 1/V \cdot T_{in} - 3 \end{bmatrix} ; \quad T = \begin{bmatrix} UA/(V \cdot \rho \cdot Cp) \\ UA/(V_j \cdot \rho_j \cdot Cp_j) \\ UA/(V_j \cdot \rho_j \cdot Cp_j) + F_j/V_j \end{bmatrix}$$

Et le modèle dans l'espace d'état s'écrit :

$$\begin{cases} \dot{X}_1 = -k \cdot e^{-u} \cdot X_1 \\ \dot{X}_2 = \Delta H \cdot k \cdot e^{-u} \cdot X_1 - 3 \cdot X_2 / V \\ \dot{X}_3 = 1/V \cdot T_{in} - 3 \cdot X_3 / V \end{cases} \tag{2.43}$$

$$Y = \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \end{bmatrix} \tag{2.44}$$

A partir du modèle dans l'espace d'état peut-être obtenue le schéma bloc de ce réacteur, figure (2.12):

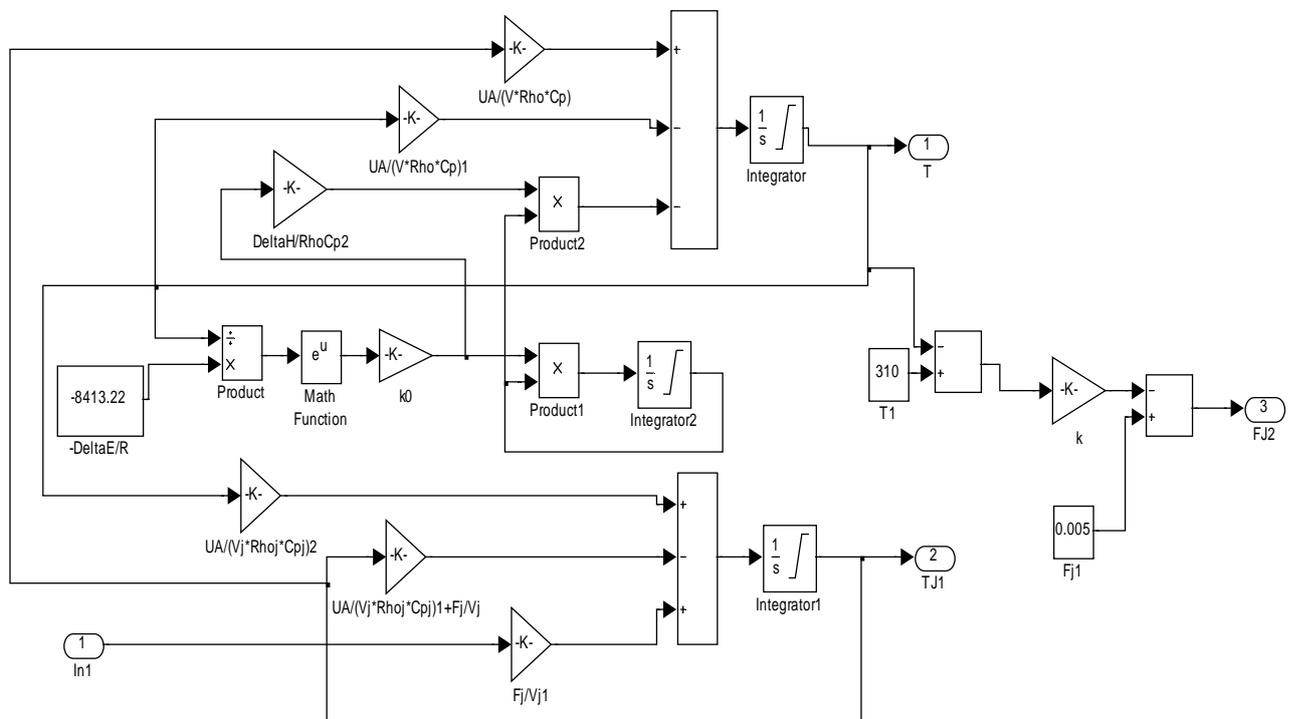


Figure 2- 24 Schéma bloc de réacteur discontinu

Tableau 2- 6 Caractéristiques du réacteur discontinu

volume du réacteur	$V=1,5 \text{ m}^3$
Constante cinétique	$K_0=2*10^7 \text{ s}^{-1}$
Energie d'activation d'Arrhenius	$E=7*10^4 \text{ J.mol}^{-1}$
Chaleur de réaction	$\Delta H=-7*10^4 \text{ J.mol}^{-1}$
Masse volumique du contenu	$P=1000 \text{ kg.m}^{-3}$
Capacité calorifique du contenu	$C_p=3000 \text{ j.kg}^{-1}\text{k}^{-1}$
Température de l'échangeur froid	$T_f=280 \text{ K}$
Température de l'échangeur chaud	$T_c=360 \text{ K}$
Débit de fluide caloporteur	$F_j=5*10^{-2} \text{ m}^3\text{s}^{-1}$
Volume de la double enveloppe	$V_j=0.1 \text{ m}^3$
Coefficient de transfert de chaleur entre la double enveloppe et le contenu du réacteur	$U=900 \text{ W.m}^{-2}\text{k}^{-1}$
surface de transfert de chaleur	$A=20 \text{ m}^2$
masse volumique du fluide caloporteur	$P_j=1000 \text{ kg.m}^{-3}$
capacité calorifique du fluide caloporteur	$C_{pj}=4200 \text{ j.kg}^{-1}\text{k}^{-1}$
gain proportionnel du régulateur de niveau de débit F_j	$K =0.015 \text{ s}^{-1}$

2.6. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté la modélisation des réacteurs chimiques. Ce dernier peut être analytique à partir des équations différentielles, soit graphique à l'aide de l'outil MATLAB/SIMULINK. Parmi les divers types de réacteurs présentés dans le premier chapitre, on a trouvé deux modèles pour la modélisation, l'un réacteur continu, et le second réacteur discontinu. On conclut que le réacteur continu contient un régulateur proportionnel de niveau, par contre dans le réacteur fermé n'utilise pas ce régulateur.

Symboles

Symbol	Description de symbol	Unité
F	Débit de fluide	$\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$
n	Nombre de mole	Mol
C_A	Concentration de l'espèce A	$\text{mol} \cdot \text{m}^{-3}$
T	Température	K
V	Volume	m^3
K_0	Constante cinétique	s^{-1}
E	Energie d'activation d'Arrhenius	$\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$
H	Chaleur de réaction	$\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$
P	Masse volumique	$\text{Kg} \cdot \text{m}^{-3}$
C_p	Capacité calorifique	$\text{j} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{k}^{-1}$
U	Coefficient de transfert de chaleur	$\text{.m}^{-1} \cdot \text{k}^{-1}$
A	Surface de transfert	m

Chapitre 03

SIMULATION DES DEUX REACTEURS

3.1. Introduction

La simulation est une expérience menée sur un modèle, elle permet dans un premier temps de valider le modèle en comparant les résultats de l'expérience et de la simulation, puis une extrapolation des conditions d'expérience dans un cadre limité.

La simulation d'un système en temps continu est généralement obtenue par un algorithme d'intégration numérique, l'utilisateur doit choisir celui qui est le mieux adapté (méthode, pas de calcul et la précision). Elle apporte un grand nombre d'avantages par rapport à une démarche basée sur l'expérience.

Elle permet d'étudier des phénomènes pour les quels l'expérience n'est pas possible (climatologie, phénomène de combustion-explosion). Le temps de simulation ne dépende de la complexité du système, du choix et des réglages de l'algorithme d'intégration numérique et des performances de la machine informatique qui exécute la simulation.

La partie simulation de notre travail, réside dans la représentation, des deux réacteurs chimiques continus et discontinu, et des paramètres (la concentration, la température et le volume).

Chaque paramètre n'est pas stable au débit de la réaction, elle obtenu des propriétés qui fait la commande de la variation de ce variable. Comme il sera présenté dans ce chapitre.

3.2. Simulation de réacteur discontinu

3.2.1. L'évolution de la température dans le réacteur

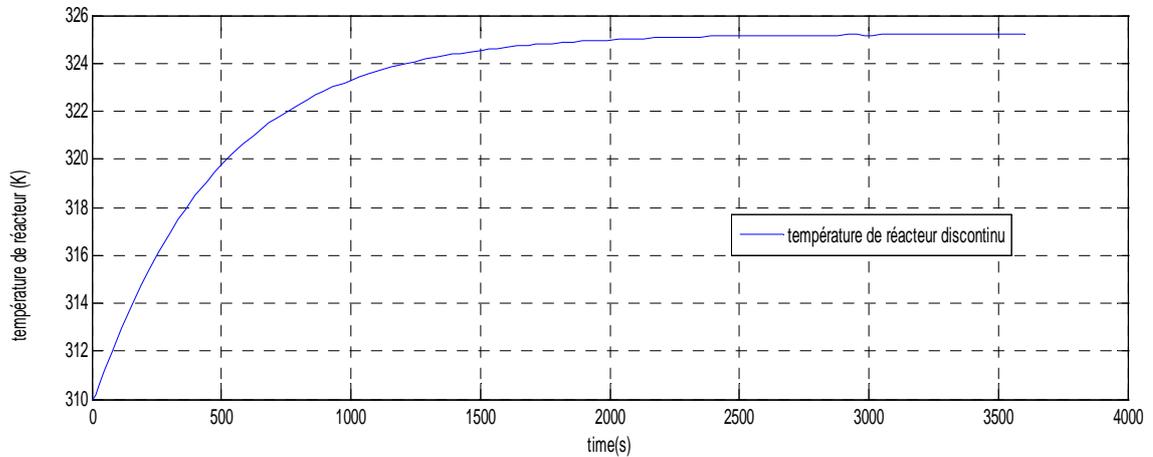


Figure 3- 11 La température de réacteur

On remarque que La température dans le réacteur varie entre $T=310$ K jusqu'à $T=325.5$ K. La stabilité de la température est à partir de ($t=2200s$).

3.2.2. L'évolution de la température dans la double enveloppe

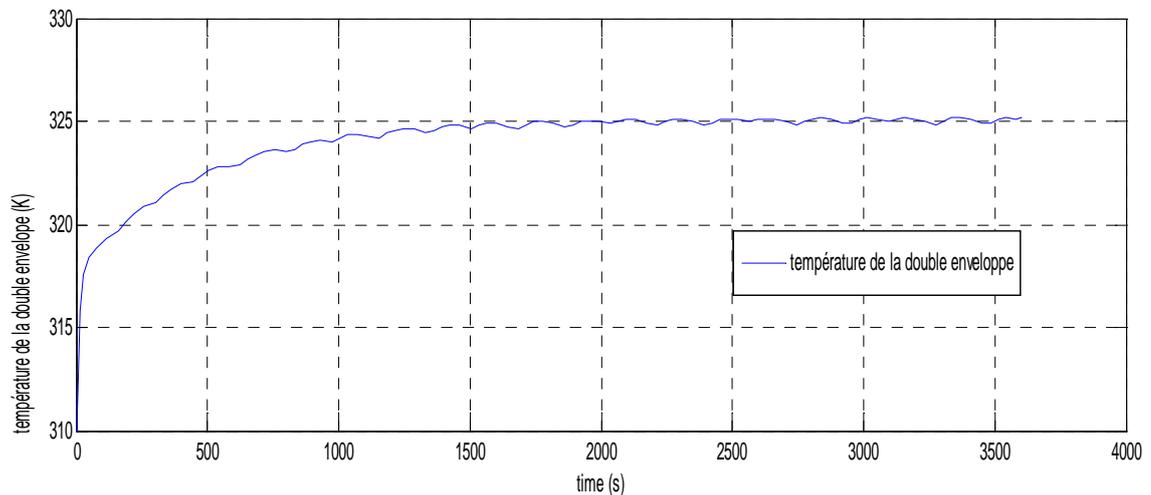


Figure 3- 12 La température de la double enveloppe

La température de la double enveloppe varie entre $T=310$ K et stabilisé à $T=325$ K. Le phénomène de vibration de signal de la double enveloppe est due au contact avec la température de réacteur.

En remarque que la température de la double enveloppe à $t=0$ augmente jusqu'à $T= 316$ K.

La figure suivante montre que la réaction se déroule entre $t = [0 \text{ } 100\text{s}]$, et la température de la double enveloppe T_j augment de façon ordinaire.

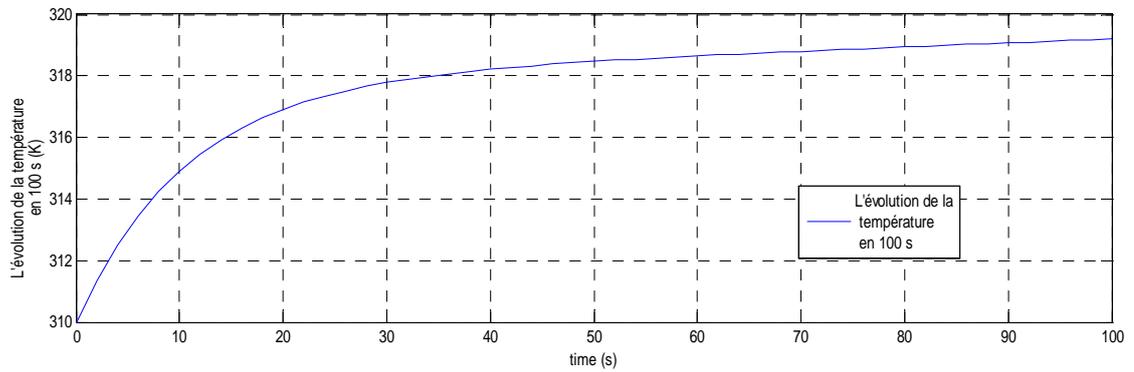


Figure 3- 13 Température de la double enveloppe en 100s

3.2.3. L'évolution de niveau de débit F_j

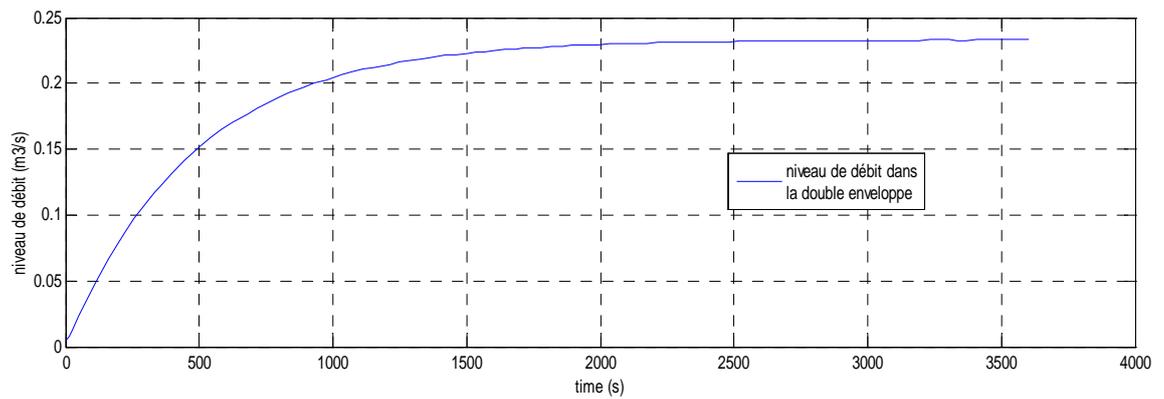


Figure 3- 14 L'évolution de niveau de débit

Le niveau de débit dans la double enveloppe varie entre l'état initial $0.005 \text{ m}^3/\text{s}$ et l'état de stabilité $0.24 \text{ m}^3/\text{s}$.

3.3. Simulation de réacteur continu

3.3.1. L'évolution de la température dans le réacteur

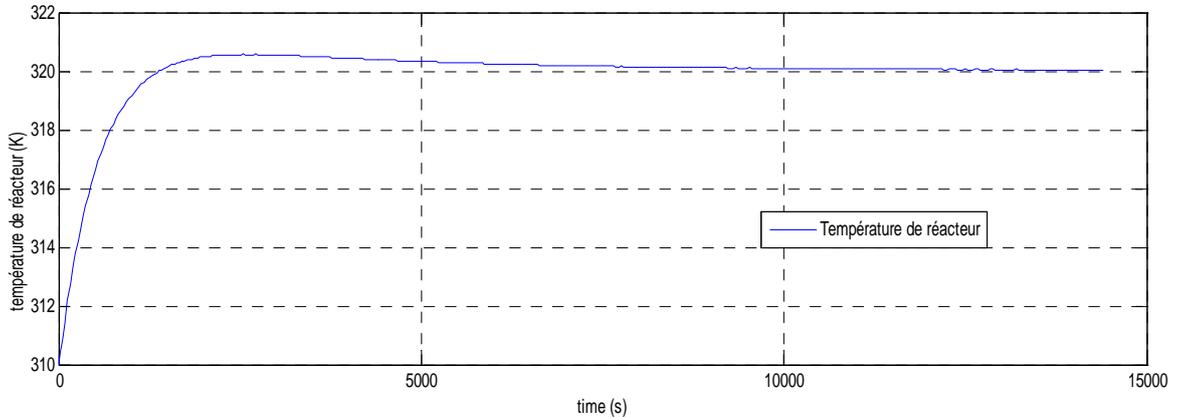


Figure 3- 15 La température de réacteur

La température dans le réacteur varie entre $T=310$ K jusqu'à $T=320.5$ K. La stabilité de la température est à partir de ($t=8000s$).

3.3.2. L'évolution de la température dans la double enveloppe

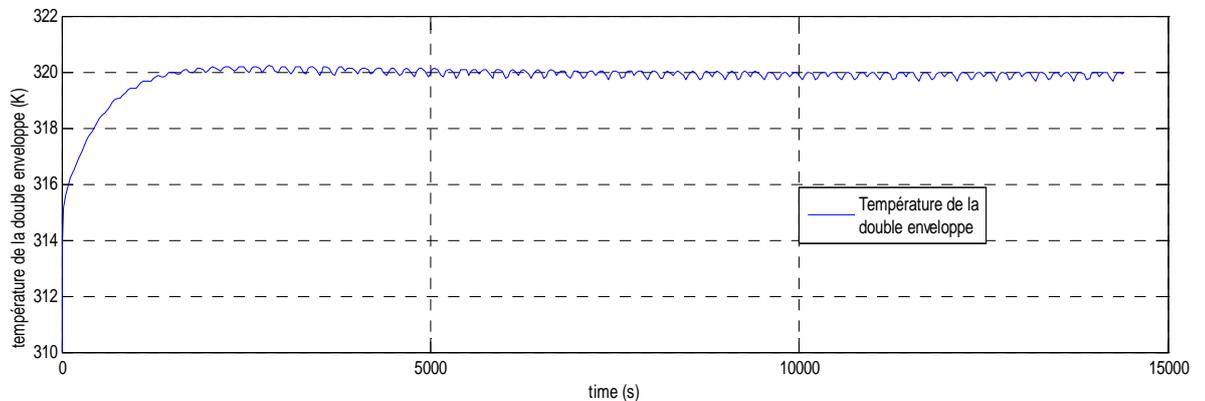


Figure 3- 16 La température de la double enveloppe

La température de la double enveloppe varie entre $T=310$ K et stabilisé à $T=320$ K. En remarque que la température de la double enveloppe à $t=0$ augmente jusqu'à $T=316$ K de façon plus rapide.

La figure suivant montre que la réaction se déroule entre $t = [0 \ 100s]$, et la température de la double enveloppe T_j augment de façon ordinaire.

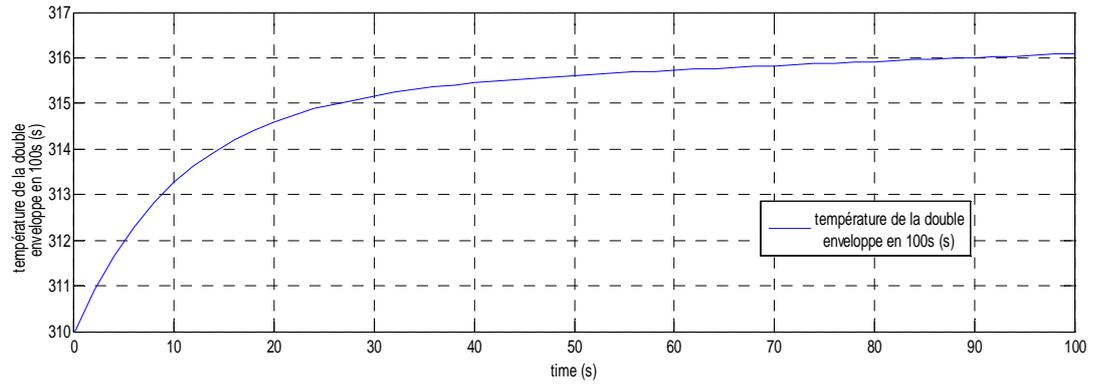


Figure 3- 17 Température de la double enveloppe en 100s

3.3.3. L'évolution de volume

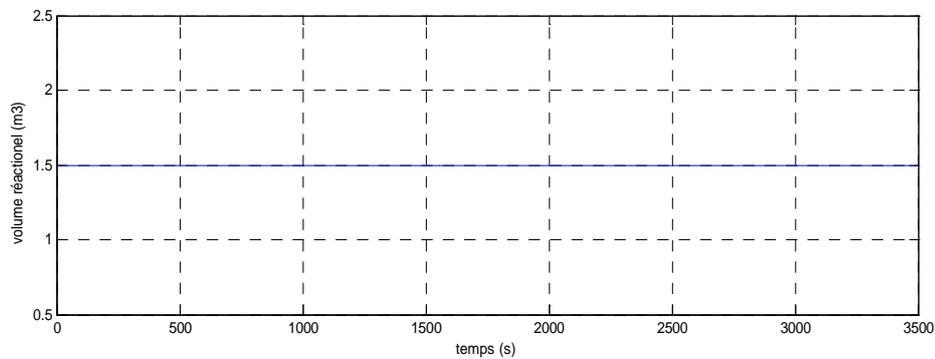


Figure 3- 18 Volume réactionnel

Dans cette réaction chimique le temps de départ est à partir de l'égalité de débit d'entrée (F_0), avec débit de sortie (F), et donc le volume réactionnel considéré comme constant. D'autre part ne dépasse pas le volume consigné V_c .

3.3.4. L'évolution de concentration

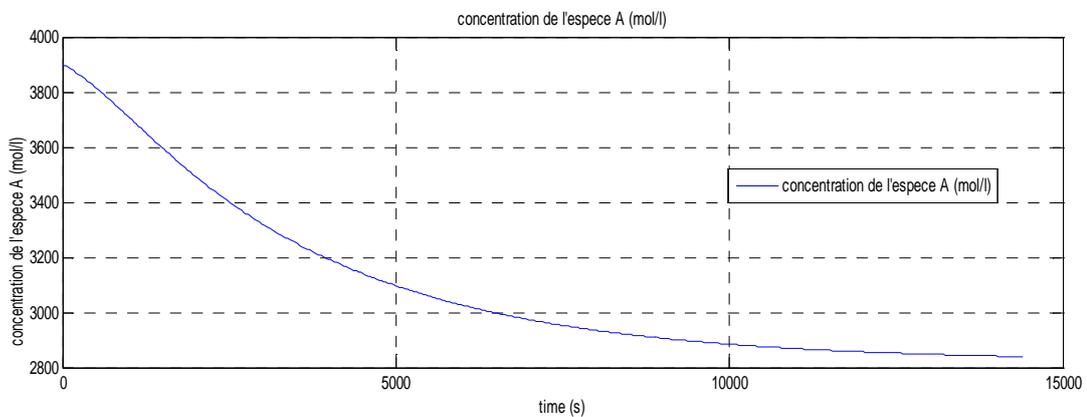


Figure 3- 19 Concentration de l'espece A

En remarque que la concentration est démunie entre A $3900 \text{ m} / \text{m}^3$ jusqu'à A $2850 \text{ m} / \text{m}^3$. Alors dit une partie de concentration de l'espèce A elle transformé vers l'espèce B.

3.3.5. L'évolution de niveau de débit F_j

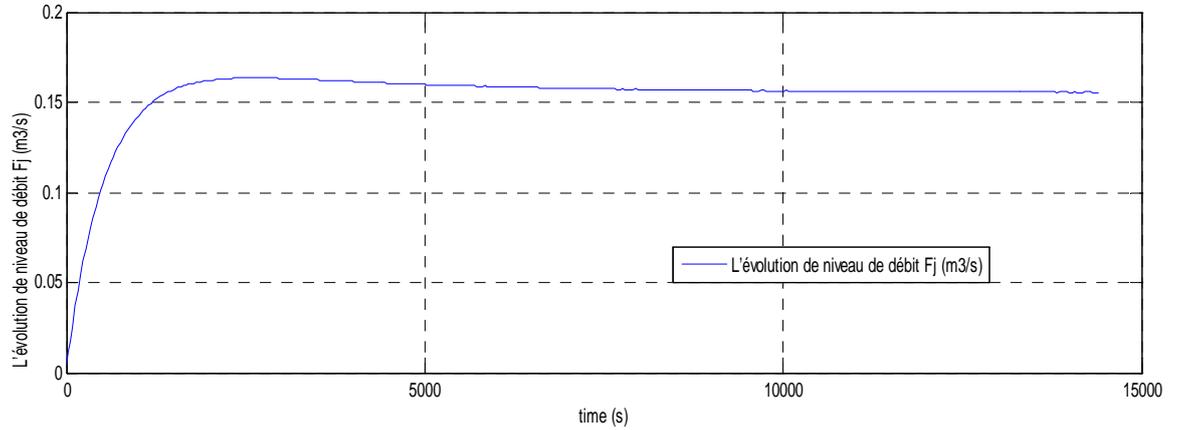


Figure 3- 20 L'évolution de niveau de débit

Le niveau de débit dans la double enveloppe varie entre l'état initial $0.005 \text{ m}^3 / \text{s}$ et l'état de stabilité $0.155 \text{ m}^3 / \text{s}$.

3.4. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons simulé deux réactions chimiques simple d'ordre ($n=1$), a partir des caractéristiques du deux réacteur, sont données dans les tables (2.02), (2.03). Nous avons représenté la variation des paramètres se qui compose l'espèce A (température, volume, concentration) dans les réacteurs, en fonction de temps.

CONCLUSION GENERALE

La modélisation des systèmes thermiques, thermodynamiques ou tout simplement en génie des procédés reste encore un domaine ouvert en raison de la complexité de ces phénomènes.

Ce sont pourtant ces types de processus, présents dans les industries à risque qui nécessitent pour leur connaissance et leur contrôle des modèles de plus en plus précis et exploitables.

Ces procédés industriels possèdent un comportement fortement non linéaire dû principalement à l'interaction mutuelle de plusieurs phénomènes de natures diverses et l'association de composants technologiques qui mettent en œuvre des lois issues de disciplines différentes (mécanique, thermique, chimique...).

Le comportement dynamique de ce type de systèmes est décrit généralement par des équations différentielles ou algèbro-différentielles non linéaires. Leur mise en équations et la déduction des variables d'état se basent sur l'établissement des différents bilans.

Dans ce travail, nous avons traité des modèles pour les réacteurs chimiques et les validés par une simulation, en utilisant l'outil MATLAB/SIMULINK. Les résultats obtenus sont comparés avec celles prises dans un Livre (il est pris comme référence).

Références Bibliographiques

- **Livres**

[1]: Trambouze Pierre / Euzen Jean-Paul, «Les réacteurs chimiques », Paris 2002

[2]: Jacques villermaux, « Réacteurs chimiques, principe ».

Technique de l'ingénieur, traité génie des procédés.

[3]: Christian Charlier, « les opérations chimiques unitaire », deuxième édition 2000. [Pdf]

[4]: Jean-Paul Gourlia, « modélisation en génie des procédés ».

Technique de l'ingénieur, traité génie des procédés.

[5]: Sandrine Le Ballois, « MATLAB/SIMULINK » application à l'automatique linéaire,
Paris 2002

[7]: Jean-Pierre Corriou, «commandes des procédés », deuxième édition.2003

[8]: William.L.Luyben, « process modeling, simulation and control for chemical Engineers»,
Second edition 1990 [Pdf].

[9] : André Bontemps, Alain Garrigue, Charles Goubier. « Echangeurs de chaleurs ».

Technique de l'ingénieur, traité génie énergétique.

- **Thèse**

[6]: Betchine Fatima, « réalisation d'une bibliothèque Matlab _ simulink d'un générateur
De vapeur » .Mémoire de magister, université Ferhat abbas de setif juin 2009

ملخص

في الكيمياء، العمليات الكيميائية هي في المقام الأول. المفاعل هو المرحلة الثانية من التمثيل العام لعملية صناعية في هذه المرحلة من مراحل التحول يتم إنشاء جزيئات جديدة. ونقطة الانطلاق لأي عملية في الهندسة هو التوازن المواد التي أعرب عنها في رد الفعل أو المنتج.

الكميات التي غالبا ما تقاس في المفاعلات الكيميائية هي الضغط، التدفق، درجة الحرارة، والتركيز المولي. من بين أنواع المفاعلات الكيميائية نجد نموذجين الأكثر استعمالا، مفاعل الدفعة، و الثاني مفاعل مستمر.

MATLAB / SIMULINK هو واجهة رسومية تسهل تحليل للنظام في المجال الوقت

كلمات مفتاحيه :مفاعل كيميائي , اعداد نموذج , محاكات

Résumé :

Dans la chimie, des opérations chimiques s'occupent essentiellement des réacteurs. Le réacteur est la deuxième étape de la représentation générale d'un procédé industriel. C'est l'étape de la transformation de la matière, où de nouvelles molécules sont créées. Le point de départ pour toute modélisation en génie des procédés c'est le bilan de matière exprimé en réactifs ou produit.

Les grandeurs les plus souvent mesurées dans les réacteurs chimiques sont la pression, le débit, la température, la concentration.

Parmi les divers types de réacteurs, on à trouver deux modèle pour fait la modélisation, l'un réacteur discontinu, et le seconde réacteur continu.

L'outil MATLAB/SIMULINK , est une interface graphique qui facilite l'analyse de système dans le domaine temporel.

Mots Clés : réacteur chimique, modélisation, simulation.

Abstract:

In chemistry, chemical operations are primarily concerned reactors. The reactor is the second stage of the general representation of an industrial process. This is the stage of the transformation of matter, where new molecules are created. The starting point for any modeling in process engineering is the material balance expressed in reactive or product.

The quantities most often measured in chemical reactors are pressure, flow, temperature, concentration.

Among the various types of reactors, we find two models made for modeling, batch reactor, and the second continuous reactor.

The tool MATLAB / SIMULINK is a graphical interface that facilitates the analysis of system in the time domain.

Key Words :Réactor chimique, moélisation ,simulation