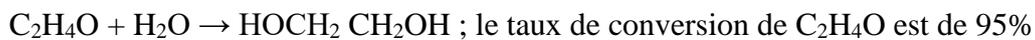


**Simulateurs en génie des procédés**  
**Travaux Dirigés N° 01**

**Exercice 01 : Réacteur à conversion (Conversion reactor)**

L'éthylène glycol (HOCH<sub>2</sub> CH<sub>2</sub>OH) est produit par l'hydratation directe de l'oxyde d'éthylène (C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>O). La réaction se déroule en phase liquide sans catalyseur et à la température de 200 °C. Outre l'hydratation de l'éthylène en éthylène glycol, son hydroxyalkylation ultérieure pour la formation de diéthylène glycol ou de glycols lourds peut également avoir lieu.

Pour éviter les réactions subséquentes, le procédé est réalisé avec un grand excès d'eau. On considère la réaction principale et la réaction secondaire suivantes :



Le rapport molaire de Ethylène oxyde / Eau = 1/12. L'eau et l'éthylène oxyde sont introduits dans le réacteur à 25 °C et 3 MPa. La température du réacteur est de 200 °C et sa pression est de 3 MPa.

- Calculer la composition du produit de réacteur.
- Calculer la chaleur du réacteur si 100 kmole/h d'oxyde d'éthylène sont traités.

Utiliser le modèle NRTL-RK

**Exercice 02 : Modèles de réacteurs à l'équilibre chimique (Equilibrium reactor)**

Les deux réactions suivantes se produisent lors de la production de gaz de synthèse à partir de gaz naturel.



La première réaction est la réaction de reformage, et la seconde est la réaction de déplacement de gaz vers l'eau (water-gas shift reaction) par laquelle plus d'hydrogène est produit et le CO est transformé en CO<sub>2</sub>.

Pour ce calcul, on considère que le gaz naturel, pauvre en méthane est introduit dans le réacteur à 400 °C et 34 bars. La vapeur surchauffée est alimentée à 280 °C et 34 bars ; le débit molaire de CH<sub>4</sub> est de 90 kmole/h, et le flux molaire de vapeur est de 235 kmole/h.

- Calculer la composition des produits à la température du réacteur variant entre 350 et 900 °C.

**Exercice 03 : Modèle de réacteur cinétique (CSTR)**

On considère le procédé de fabrication de l'acétate d'éthyle. L'éthanol réagit avec l'acide acétique en phase liquide pour former de l'acétate d'éthyle et de l'eau par la réaction suivante :



La cinétique de la réaction est donnée par la relation d'Arrhenius :  $K = 1,206 \cdot 10^6 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right)$

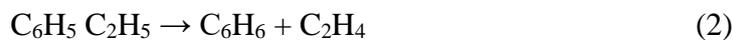
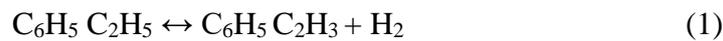
Avec  $E = 54240 \text{ kJ/kmole}$

Un réacteur CSTR est alimenté par un mélange de deux flux d'éthanol et d'acide acétique. Chacun des deux flux a un débit molaire de  $50 \text{ kmole/h}$ , une température de  $20 \text{ °C}$  et une pression de  $110 \text{ kPa}$ . La température dans le réacteur est de  $50 \text{ °C}$ , et la pression est de  $101 \text{ kPa}$ . Le volume du réacteur est de  $3 \text{ m}^3$ . Utiliser le modèle thermodynamique NRTL-PR.

- Calculer la composition du produit sortant du réacteur.
- Donner la variation de taux de conversion en fonction du volume de réacteur variant entre  $0,5$  et  $6 \text{ m}^3$ .

**Exercice 04 : Modèle de réacteur cinétique (Plugflow- Réacteur Piston)**

Le styrène est produit par déshydrogénation catalytique de l'éthylbenzène (réaction 1) à partir des températures de  $630 \text{ °C}$  et des pressions légèrement supérieures à la pression atmosphérique en présence de vapeur d'eau. Deux réactions secondaires ont lieu dans ce procédé : la pyrolyse de l'éthylbenzène en benzène et éthylène (Réaction 2) et l'hydrodésalkylation de l'éthylbenzène (Réaction 3), où le toluène et le méthane sont produits. Les cinétiques des réactions sont présentées par la relation d'Arrhenius :  $k = A \cdot \exp(-E/R.T)$



Constantes	A	E (kJ/mole)
Réaction 1	3524,4	158,6
Réaction 2	$2604 \cdot 10^3$	114,2
Réaction 3	71116	208

L'éthylbenzène et la vapeur d'eau entrent dans le réacteur multitubulaire avec un rapport molaire de débit de vapeur/éthylbenzène =  $10/1$  ( $15 \text{ kmole/h}$  d'éthylbenzène et  $150 \text{ kmole/h}$  de vapeur). Le réacteur est constitué de 500 tubes d'un diamètre interne de  $6 \text{ cm}$ , d'une épaisseur de paroi de  $5 \text{ mm}$  et d'une longueur de  $4 \text{ m}$ . Les tubes sont remplis de particules de catalyseur, en considérant une géométrie sphérique des particules de  $5 \text{ mm}$  de diamètre et une fraction de vide de tube de  $0,45$ . La température initiale de l'alimentation est de  $630 \text{ °C}$ , et la pression initiale est de  $137,8 \text{ kPa}$ .

- Calculer la composition de produit et les profils de température et de pression le long du réacteur
- Si le réacteur fonctionne dans des conditions adiabatiques, conversion de l'éthylbenzène et la sélectivité en styrène le long du réacteur.