

# CALCUL D'UN REACTEUR TUBULAIRE NON ISOTHERME POUR LA SYNTHÈSE DU CETÈNE PAR CRAQUAGE DE L'ACÉTONE

BOUSSEMGHOUNE mohamed<sup>1</sup>, SAOULI ouacil<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire de l'Ingénierie des Procédés de l'Environnement (LIPE). Faculté de génie des procédés.  
Université Constantine 3. Algérie, E-mail : moh.boussemghoune@gmail.com

<sup>2</sup>Unité de recherche des sciences des matériaux et applications, Ecole Nationale polytechnique. Constantine.  
Algérie, E-mail : saouli\_ouacil2000@yahoo.fr

## RÉSUMÉ

Les réacteurs tubulaires sont des systèmes continus aptes à mettre en œuvre des réactions dans les conditions opératoires très variées (haute température). Le cétène est utilisé principalement pour la synthèse de produits pharmaceutiques, de colorants, etc...La réaction de synthèse du cétène par craquage thermique à haute température de l'acétone est une réaction rapide, fortement endothermique nécessite donc de faible temps de séjour (de l'ordre de la seconde). Le mélange des réactifs doit être préparé à l'entrée du réacteur aux conditions de température de la réaction. L'objectif est de résoudre le système d'équations non linéaires issue des bilans microscopiques de matière et de chaleur en régime permanent. Le réacteur tubulaire est homogène avec température constante de la jacket. L'influence des différents paramètres tels que le débit volumique, la surface d'échange, la température de la jacket et la température d'entrée sur l'avancement de la réaction a été étudiée.

**Mots Clés:** Réacteur, Cétène, Endothermique, Craquage.

---

## NOMENCLATURE

### Symboles :

A surface d'échange,  $m^2/m^3$

k constante de vitesse

P pression totale, atm

T température, K

q débit,  $m^3/s$

V volume,  $m^3$

U coefficient global de transfert de chaleur,  $W/(m^2.K)$

X taux de conversion

$\Delta H_R$  enthalpie de la réaction

### Indices / Exposants :

A acétone

f entrée du réacteur

j jacket

R réacteur

---

## 1. INTRODUCTION

Le cétène est utile dans de nombreux domaines, en particuliers dans l'industrie pharmaceutique et agroalimentaire. Le cétène peut être obtenu par thermolyse de l'acétone en présence de catalyseur dans un réacteur tubulaire. Néanmoins, les contraintes liées à la nécessité de réaliser un écoulement de type piston peuvent conduire à des difficultés de réalisation pratique, si l'on doit concevoir des systèmes aptes à traiter des quantités importantes et ce avec des temps de séjour importants. Dans ce travail, nous allons présenter les résultats obtenus de la modélisation des phénomènes de transfert de matière et de chaleur. La méthode Rung

Kutta d'ordre 4 a été utilisée pour résoudre les équations de bilans obtenues. L'effet de quelques paramètres sur les profils de concentration et de température a été aussi étudiée.

## 2. DESCRIPTION DU PROCÉDÉ

L'acétone rentre dans le réacteur tubulaire catalytique ou il sera converti en méthane et cétène selon la réaction suivante (voir Figure 1) :

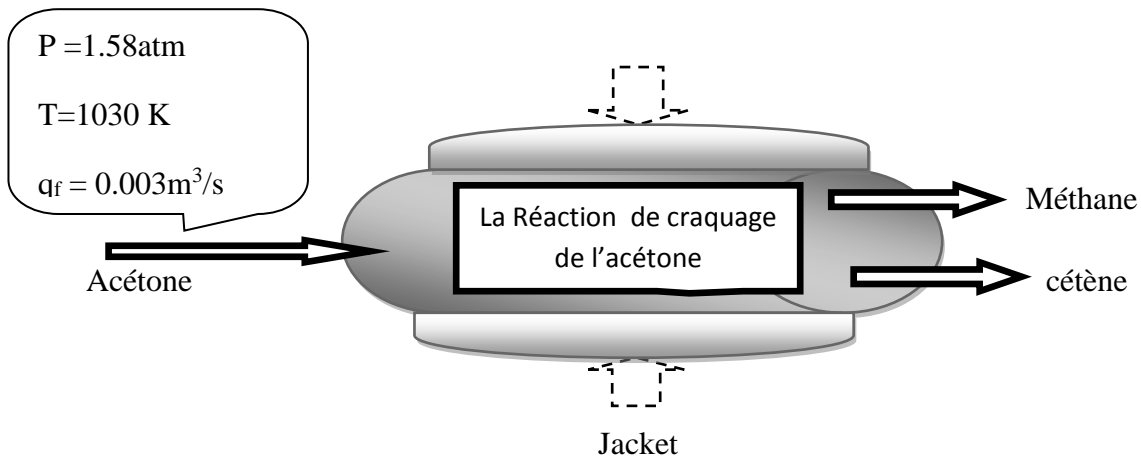
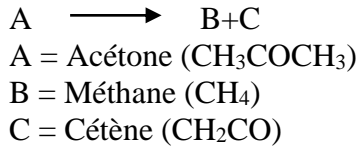


Figure 1 : Réacteur tubulaire pour la fabrication du cétène.

Les données utilisées pour une première simulation numérique sont les suivantes [3] [4] :

- La température d'entrée du réacteur  $T_f=1030$  K,
- La pression totale  $P=1.58$  atm,
- Le débit volumique à l'entrée du réacteur  $q_f=0.003$  m<sup>3</sup>/s,
- La surface d'échange  $A=160$  m<sup>2</sup>/m<sup>3</sup>,
- Le coefficient global de transfert de chaleur  $U=110$  W/(m<sup>2</sup> K) ,
- Le réacteur est tubulaire de volume  $V_R = 1$  m<sup>3</sup>, La température de la jacket  $T_j=1200$  K,
- La réaction est considérée d'ordre 1 dont la constante de vitesse est donnée par :

$$k = 3.56 * e^{\left(\left(\frac{1}{1030}\right) - \left(\frac{1}{T}\right)\right) * 34200} ,$$

- L'enthalpie de la réaction est donnée par :

$$\Delta H_R = 80700 + 6.7 * (T - 298) - 5.7 * 10^{-3} * (T^2 - 298^2) - 1.27 * 10^{-6} * (T^3 - 298^3) J/mol.$$

### 3. MODELE MATHEMATIQUE

Les équations suivantes sont obtenues en faisant des bilans de matière et de chaleur sur un élément de volume élémentaire  $dV$  du réacteur (écoulement piston) :

- Bilan de matière :  $\frac{dx_A}{dV} = \left(\frac{3.56 \cdot T_f}{q_f \cdot T}\right) * \left(\frac{1-x_A}{1+x_A}\right) * \exp\left(\left(\frac{1}{1030}\right) - \left(\frac{1}{T}\right)\right) * 34200 = f_1(x_A, T)$
- Bilan thermique :  $\frac{dT}{dV} = (A * U * (T_j - T) - (80700 + 6.7 * (T - 298) + 5.7 * 10^{-3} * (T^2 - 298^2) - 1.27 * 10^{-6} * (T^3 - 298^3)) * \exp\left(34200 * \left(\left(\frac{1}{1030}\right) - \left(\frac{1}{T}\right)\right) * \left(\frac{P_0}{R * T_f}\right) * \left(\frac{1-x_A}{1+x_A}\right)\right)) / (\sum_{i=1}^3 F_i * C p_i) = f_2(x_A, T)$

C'est un système d'équations différentielles ordinaires (couplées). La résolution a été faite en utilisant la méthode de Rung-Kutta d'ordre 4.

### 4. RESULTATS

L'étude des phénomènes de transfert de masse et de chaleur conduit à un modèle représentatif du comportement des réactifs et des produits dans le réacteur choisi. Ce modèle représente généralement des équations différentielles, dont la résolution donne les profils de concentration et de température. En premier temps, on a trouvé que le réacteur est surdimensionné. On a essayé de diminuer le volume jusqu'à  $V=0.006 \text{ m}^3$ . La Figure suivante représente le résultat obtenu.

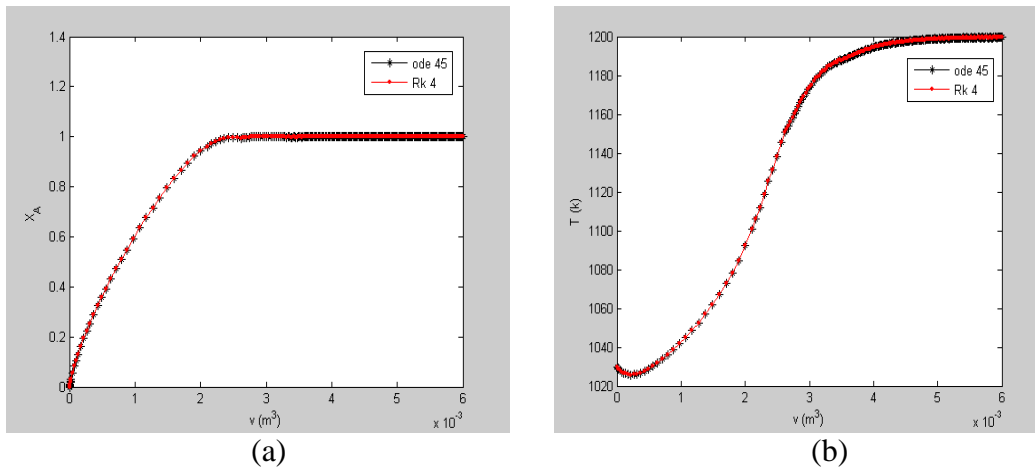


Figure 2 : variation du taux de conversion (a) et de température (b) en fonction du volume de réacteur.

La Figure 2 (b) montre bien la diminution de la température à l'entrée du réacteur qui atteint 1022 K, cela signifie que dans cette petite zone d'entrée, la chaleur consommée par la réaction endothermique est supérieure à la chaleur venant de la jacket.

- **Effet de débit d'entrée  $q_f$**

Nous observons pour toutes nos valeurs choisies de  $q_f$  que le temps de résidence est inférieur à 1 seconde pour une conversion totale. Par exemple, pour un débit  $q_f=0.009 \text{ m}^3/\text{s}$ , le taux de conversion atteint 1 après un temps de résidence inférieur à 1 seconde (Figure 3 (a)), par contre, la température maximale de 1200 K est atteinte après un temps de résidence de  $0.014/0.009 = 1.55 \text{ sec}$ .

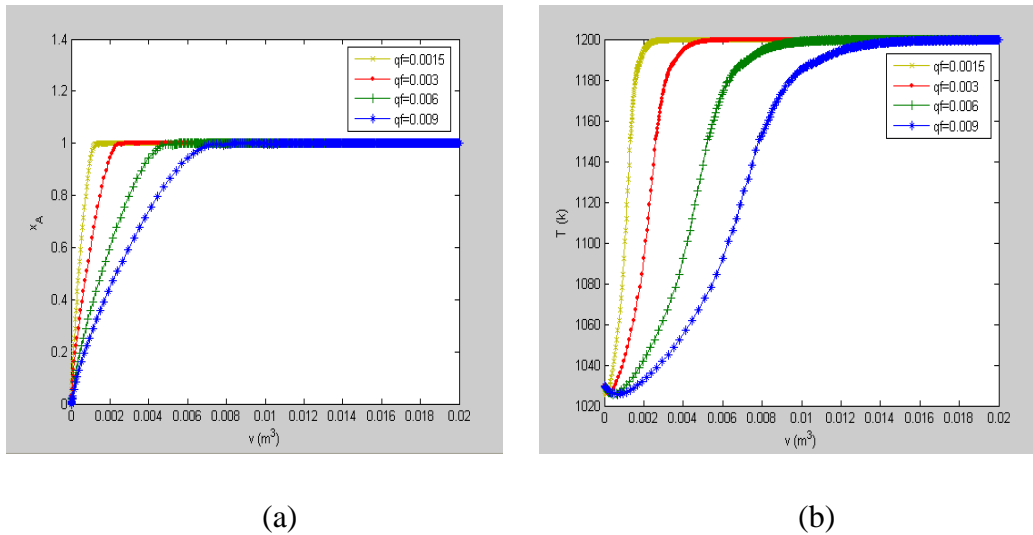


Figure 3 : variation du taux de conversion (a) et de température (b) en fonction du volume de réacteur à différents valeurs de débit d'entrée.

Maintenant, nous nous intéressons aux premières fractions de seconde du temps de résidence (Figure 4). Nous observons que la température minimale atteinte est de 1025 K.

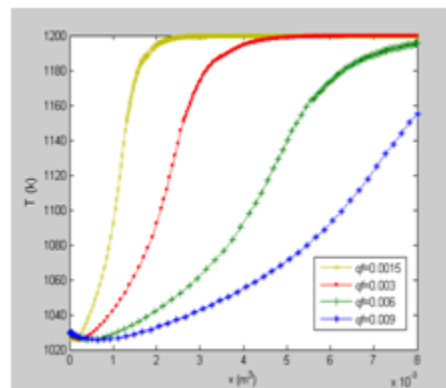
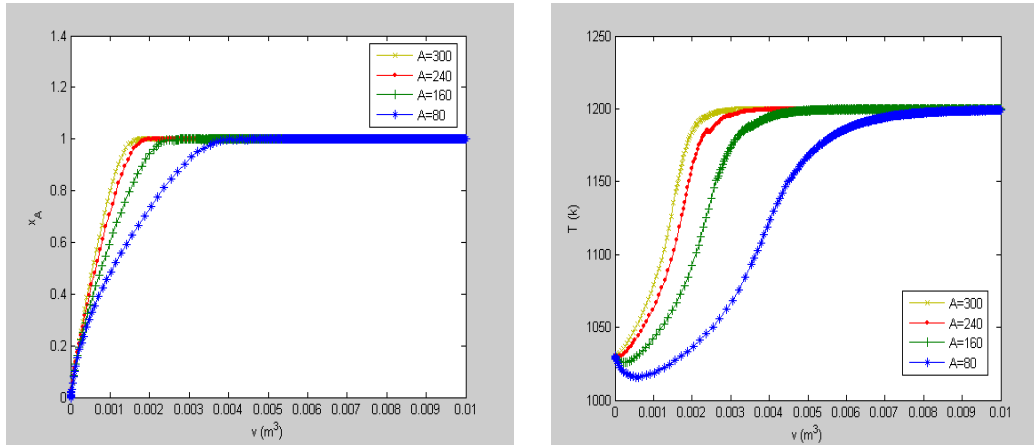


Figure 4 : Profils de température à l'entrée.

• **Effet de la surface d'échange A**

Ensuite, nous étudions l'effet de la variation de la surface d'échange A (A=.300; 240 ; 160 et 80 m<sup>2</sup>/m<sup>3</sup>). La Figure (5) montre que les solutions augmentent doucement que la surface d'échange diminue, donc une réaction lente pour des valeurs faibles de la surface d'échange. Nous remarquons aussi que pour A = 300 m<sup>2</sup>/m<sup>3</sup>, il ya pas de diminution de la température à l'entrée du réacteur. Par contre, pour A=80 m<sup>2</sup>/m<sup>3</sup> par exemple, la température diminue jusqu'à atteindre 1020 K.



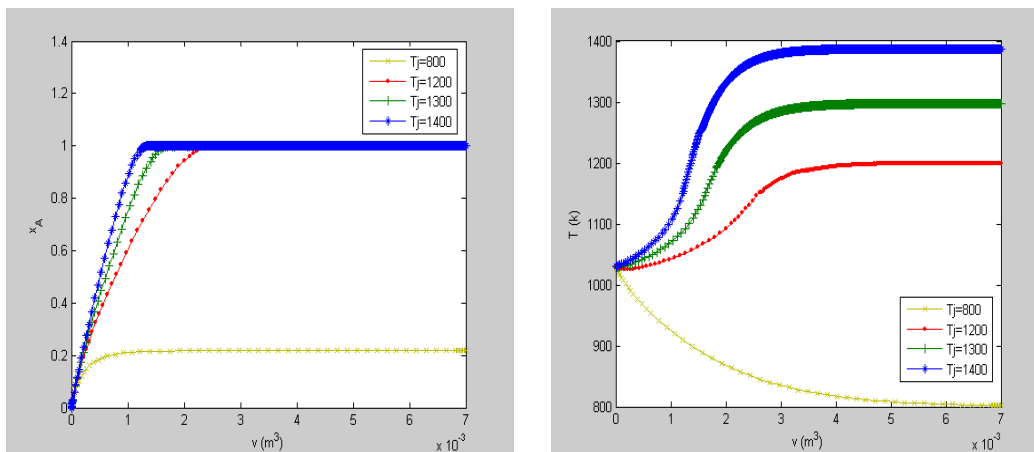
(a)

(b)

Figure 5 : variation du taux de conversion (a) et de température (b) en fonction du volume de réacteur à différents valeurs de la surface d'échange.

• **Effet de température de la jacket T<sub>j</sub>**

Après, nous allons voir les effets observés en changeant la température de la jacket T<sub>j</sub> (T<sub>j</sub>= 800 ; 1200 ; 1400 et 2000 K) tout en maintenant les autres paramètres constants comme avant.



(a)

(b)

Figure 6 : variation du taux de conversion (a) et de température (b) en fonction du volume de réacteur à différents valeurs de la température de la jacket.

Ici, les pentes des solutions augmentent avec l'augmentation de  $T_j$ . Pour une température de la jacket la plus petite ( $T_j=800$  K) nous pouvons atteindre seulement une conversion totale de 0.2

- **Effet de température d'entrée  $T_f$**

Finally, Nous traçons les effets de la variation de la température d'entrée  $T_f$  ( $T_f=900$  ; 1000 ; 1200 ; 1400 et 1600 K)

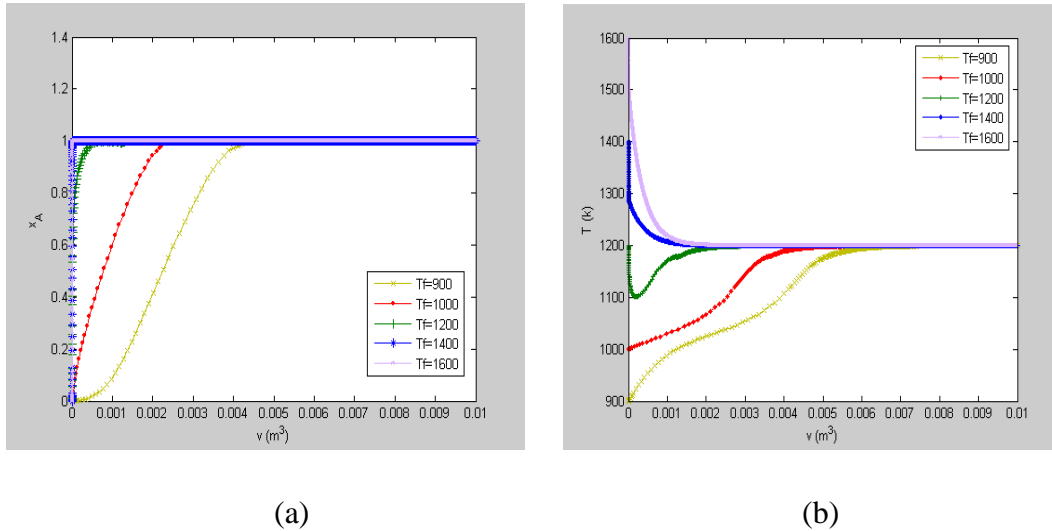


Figure 7 : variation du taux de conversion (a) et de température (b) en fonction du volume de réacteur à différents valeurs de la température d'entrée.

Toujours en maintenant les autres paramètres constants. Nous observons que le taux de conversion atteint 1 dans le cas où la température de l'alimentation est relativement élevée ( $T_f=1600$  K ou 1400 K). Donc la réaction est plus favorable et plus rapide lorsque la température d'entrée est grande.

## 5. CONCLUSIONS

Ce travail a été consacré à la modélisation d'un réacteur catalytique pour la synthèse de Cétène qui est un processus important dans l'industrie. Nous avons considéré le cas stationnaire avec une température constante de la jacket. La réaction est endothermique et d'ordre un.

Le système d'équations obtenu est résolu en utilisant la méthode de Rung-Kutta d'ordre 4. On a examiné l'effet des différents paramètres opératoires et de design qui reste l'objectif principal des simulations et des applications de modèles mathématiques réduisant ainsi le nombre d'expériences à réaliser au laboratoire ou du moins donner une idée sur les intervalles à utiliser. C'est clair que pour les paramètres opératoires initiaux, le réacteur est surdimensionné.

## REFERENCES

- [1] C.L Yaws, Matheson gas data book, McGraw-Hill, 2001.
- [2] J. M. Prausnitz, The properties of gases and liquid, McGraw-Hill, 1987.
- [3] P. Trambouze, Les réacteurs chimique , technip, 1984.
- [4] S. Elnashaie, F. Uhlig, Numerical techniques for chemical engineers using MATLAB, Springer, 2007.