

UNIVERSITÉ D'ALGER

1/75

Ecole Nationale Polytechnique

lex

DEPARTEMENT DE GENIE CHIMIQUE

THESE DE FIN D'ETUDES

**Distribution des Temps de Séjour des
Molécules dans une Cascade de
Réacteurs agités**

**Mise en Œuvre d'une Réaction du
premier Ordre dans le Réacteur
expérimental**

Proposée par :

Y. Yousfi

Dr. ès-Sciences



Etudié par :

M. CHERIEF

M. CHEBAB

JE DEDIE CE PETIT TRAVAIL A MES PARENTS.

CHEBAB

- AVANT-PROPOS -

Ce travail proposé par Monsieur Y.YOUSFI a été réalisé au laboratoire de Génie Chimique de l'ECOLE NATIONALE POLYTECHNIQUE.

Qu'il veuille bien trouver ici l'expression de nos chaleureux remerciements pour ses précieux conseils.

Nous tenons à remercier aussi vivement Monsieur BRIANT pour son aide et ses conseils.

Nos remerciements vont aussi à Monsieur MICHEL pour son aide désintéressée et ses encouragements.

Enfin, notre reconnaissance va à tous les professeurs et assistants qui ont contribué à notre formation.

NOTATIONS UTILISEES

DTS	:	Distribution des temps de séjour.
DTSE	:	" " " expérimentale.
X_i	:	Avancement relatif au constituant i .
n_i	:	Nombre de moles du constituant i .
n_{i_0}	:	" " " au temps initial.
n_I	:	" " " I.
	:	Différences des coefficients stoechiométriques du 1er et du 2ème ordre.
	:	Coefficient stoechiométrique.
		" de compressibilité.
		" d'expansion chimique.
C_i	:	Concentration du réactif i .
	:	Flux molaire.
X_S	:	Avancement à la sortie du réacteur.
X_E	:	" l'entrée "
	:	Temps de passage théorique.
\bar{t}	:	" " expérimental.
	:	Vitesse de réaction.
V_i	:	Volume du réacteur i .
θ	:	Temps réduit = t/θ
$E(t)$:	Courbe de distribution des temps de séjour des
$E(\theta)$:	molécules.
$E(\theta)$:	Courbe $E(t)$ en temps réduit.
	:	Variance de la distribution.
	:	Variance réduite.
	:	Fonction intensité.
q	:	Débit du fluide réactionnel $(CH_3)_3CCl + C_2H_5OH$

B I B L I O G R A P H I E

1. Calcul des réacteurs, G. COGNET; ENP, Alger
2. Calcul des réacteurs et Dynamique des systèmes, Y. YOUSFI; ENP, Alger 1974-1975.
3. Raffinage et Génie-Chimique, P. WHUITIER; Editions Technip, Paris 1972.
4. Méthodes cybernétiques et technologie chimique, A. KAFAROV Editions de Moscou, 1974.
5. Chemical Reaction Engineering, O. LEVENSPIEL; Wiley & Sons, New-York 1972.
6. Mélange par agitateur mécanique, C. KOEN; Cycle de perfectionnement n° V ; Centre de perfectionnement des Industries Chimiques (Nancy)
7. Thèse de Docteur-Ingénieur, André ZOULALIAN; Université de Nancy (1969).
8. Thèse de Docteur ès Sciences, André ZOULALIAN ; Université de Nancy 1973.
9. Méthodes d'optimisation , BORDET ; Centre de perfectionnement des Industries Chimiques (Nancy).
10. Thèse de fin d'études, M. FERROUKHI & M. GUEMIRI; ENP, Alger 1975.

1ere PARTIE

ETUDE THEORIQUE

D'une façon générale, on appelle réacteur chimique tout appareil où ont lieu des opérations chimiques.

LEVENSPIEL et BISCHOFF étendent encore cette définition à tout appareil où un fluide peut subir des transformations diverses:

- Il peut perdre ou gagner de l'énergie (on serait alors en présence d'un échangeur de chaleur).
- Il peut subir un transfert de matière avec une autre phase (exemple: colonne d'extraction liquide-liquide ou liquide-gaz).
- Il peut réagir chimiquement en donnant des produits nouveaux.

Le but du génie de la réaction chimique est de déterminer la taille, le type d'appareil à construire et les conditions opératoires optimales pour une opération donnée.

Ceci pose des problèmes assez complexes car la température, la pression et la composition du fluide varient à l'intérieur du réacteur et dépendent beaucoup de la nature de la réaction (exothermique, endothermique, ...). De plus, dans les réacteurs hétérogènes (réalisant un contact solide-gaz, solide-liquide, gaz-liquide, solide, etc...) se posent d'autres problèmes spécifiques aux réactions hétérogènes; celles-ci sont très sensibles aux facteurs physiques (pression, température, turbulence, ...) qui influent considérablement sur le transfert de matière et la diffusion ainsi que sur la sélectivité, paramètre important pour les réactions complexes.

Comment traiter tous ces facteurs de la meilleure façon est alors le problème principal qui se pose lors de la conception d'un réacteur chimique. De ce fait, le calcul d'un réacteur n'est pas une tâche aisée et fait appel à l'ensemble des disciplines qui constituent le génie chimique (thermodynamique, cinétique chimique, hydrodynamique, etc...). La méthode générale consistera à établir différents bilans:

- Un bilan de matière qui tiendra compte de la cinétique de la réaction chimique et les vitesses entre phases s'il y a lieu.

* de Transfert

- Un bilan d'énergie : ceci est très important dans le cas de réactions fortement endothermiques ou exothermiques où il y a un transfert de chaleur très intense.

- Un bilan de quantité de mouvement.

- Des équations dynamiques de stabilité du réacteur et donnant aussi les caractéristiques du régime transitoire.

- Enfin, une équation d'optimisation de la marche du réacteur.

Mais il est nécessaire, avant d'aborder ces calculs, de prévoir les performances du réacteur, notamment la conversion qu'on peut en attendre quand a lieu une réaction chimique. Il faut donc connaître :

- La cinétique de la réaction.

- La nature de l'écoulement.

- L'état de mélange des molécules à l'intérieur.

On distingue 2 régimes d'écoulement dits "idéaux". :

- L'écoulement piston (plug flow)

Les produits se déplacent par tranches parallèles et sont distribués uniformément dans toute section normale à la direction du mouvement. Il y a pas d'intermélangeage et cet écoulement est caractérisé par un temps de séjour unique de toutes les molécules.

- L'écoulement dans un réacteur parfaitement agité (mixed flow reactor) :

Dans ce cas, du fait d'un mélangeage idéal, la distribution des produits est uniforme dans tout le réacteur à un instant donné et les molécules peuvent y séjourner un temps quelconque.

BUT DU TRAVAIL: BTS dans une cascade de réacteurs.

Nous disposons d'une cascade de réacteurs agités dont la conception n'est pas excellente à cause de l'existence d'un "court-circuit" et de volumes morts.

En modifiant 2 paramètres: la géométrie et la vitesse des agitateurs ainsi que l'écoulement du fluide dans la cascade, on cherchera à éliminer les vortex créés par l'agitation, les court-circuits et les volumes morts afin de réaliser un bon macro-mélange. On dira que le réacteur est macroscopiquement bien agité si les temps de séjour théoriques et expérimentaux coïncident aux erreurs d'expérience près. On considérera successivement le cas de 1, 2, 3, et 4 réacteurs en série.

Ensuite, grâce à une réaction du 1er ordre (nous verrons plus loin pourquoi une réaction du 1er ordre) convenablement choisie, on déterminera la conversion expérimentale que l'on comparera à la valeur théorique, calculée par la méthode des traceurs.

En fin la dernière partie consistera à déterminer par une méthode d'optimisation directe, à partir des courbes de distribution des temps de séjour, les temps de passage du modèle tenant compte de l'écoulement dans une cascade de 2 réacteurs agités, et ceci nous permettra d'atteindre les volumes morts éventuels existant dans le réacteur.

RESUME ET CONCLUSION DU TRAVAIL REALISE

I. Modification du montage expérimental :

Trois paramètres ont été modifiés :

- On a remplacé les agitateurs à pales par des hélices marines mieux adaptées à la viscosité de l'eau.
- L'écoulement du fluide a été amélioré en réalisant une trajectoire plus sinueuse.
- La vitesse de rotation des agitateurs a été diminuée de 750tr/mn à 500tr/mn ; ce choix n'a pas été heureux car cette valeur de 500tr/mn a été trop faible.
- La cellule d'entrée qui devait servir de prémélangeur n'a pas été utilisée.

II. DTSE du fluide dans le réacteur principal :

L'enregistrement des CDTSE se fait en suivant par conductimétrie la concentration en traceur (HCl concentré) à la sortie du réacteur. L'injection utilisée (impulsion de Dirac) se fait soit à la main soit à l'air comprimé (dans le cas de deux réacteurs inégaux en particulier).

Exploitation des courbes C :

Les DTSE du fluide dans le réacteur expérimental sont interprétées à l'aide du modèle des mélangeurs en cascade.

Calcul du temps de séjour expérimental \bar{t} et de J (nombre de réacteurs théoriques) :

Les valeurs de \bar{t} sont calculées à partir des courbes C, par la méthode des moments.

Pour J, on a utilisé la méthode de la variance et la méthode graphique à partir des courbes $E(\theta)$. On a toujours $J_{théo} > J_{réel}$.

On a tracé aussi à partir des courbes $C(t)$, les courbes $F(t)$, $I(t)$ et $\lambda(t)$. Ces dernières nous ont permis de confirmer l'existence de volumes morts.

discontinue

OPERATION CONTINUE

Phases en Présence		Réacteur tubulaire		Réacteur Etage		Réacteur Parfaitement Agité
		Courants Parallèles	Contre-Courant	Courants Parallèles	Contre-Courant	
GAZ		Craquage thermique				
Liquide	Grignard					
GAZ + LIQUIDE	Semi-Continue		Tour d'Adsorption			
LIQUIDE + LIQUIDE	Grignard		Colonne d'extraction			Nitration
GAZ + SOLIDE	Cementation Nituration		Lit fixe Lit Mobile		Lit fluidisé à étages	Lit fluidisé
LIQUIDE + SOLIDE	Attaque d'un Minéral		Echangeurs d'ions			
GAZ + LIQUIDE + SOLIDE	Bombe à Hydrogène	Hydrodésulfuration				
Schéma Opérateur						

SYSTÈME HOMOGENE

SYSTÈME HÉTÉROGENE

- type le plus utilisé
- non réalisable
- Peu Utilisé

CHAP. 1 Généralités-Rappels de quelques notions fondamentales.

1.1 Introduction-Esquisse de classement des réacteurs industriels.

L'ampleur et le développement considérable de l'industrie chimique font que l'appareillage utilisé devient de plus en plus complexe et de plus en plus diversifié.

Pour ce qui est des réacteurs chimiques, pour avoir une vue globale et claire sur le fonctionnement et l'utilisation de ces appareils, il est nécessaire de procéder à leur classement en un certain nombre de prototypes qui représenteront de façon précise au possible, les appareils industriels.

Critères de classement :

Il existe au moins 2 critères logiques de classement :

- Soit on se base sur la circulation du mélange réactionnel: on distinguera alors les réacteurs fermés, ouverts et semi-ouverts.

- Soit on se base sur la nature de l'écoulement et le degré de mélangeage des substances au cours de la réaction: on aura alors les deux cas limites du réacteur agité et du réacteur piston.

1.1.1 Principe Pour notre part, nous avons préféré, dans un but de

clarté, opter pour la classification de Trambouze (), et partir du premier point en distinguant avant tout la façon dont est menée l'opération: en continu ou en discontinu. Ensuite, on se penchera sur le nombre et la nature des phases en présence:

- réactions homogènes: phase liquide ou gazeuse.
- réactions hétérogènes à 2 phases et plus: gaz-liquide, liquide-liquide, gaz-solide, etc...

* Pour la marche en régime permanent (en continu), on aura des réacteurs ouverts où il existe au moins 2

les produits). La plupart des opérations industrielles 7
sont menées en continu.

* Pour les réacteurs fonctionnant en régime transitoire (en discontinu), on distingue entre:

+ le réacteur fermé : il n'y a pas d'échange de matière avec l'extérieur pendant la réaction.

+ le réacteur semi-fermé (ou semi-ouvert): tous les réactifs ne sont pas introduits au début de l'opération. Il y aura donc échange de matière avec l'extérieur et une partie des réactifs sera amenée en continu.

* Enfin, un dernier point à considérer est le mode de mise en contact des réactifs: à courant parallèles ou à contre-courant.

On aboutit alors à la classification de Trambouze.

1.2 Rappels de quelques notions

1.2.1. Avancement d'une réaction :

On distinguera tout d'abord entre les constituants actifs, c'est-à-dire qui participent à la réaction, et les constituants inertes qui ne réagissent pas et dont la présence sert parfois à diluer le mélange et à abaisser la pression partielle des constituants dans le cas des réactions en phase gazeuse. Définissons dès lors l'avancement d'une réaction:

Parfois, on fait le choix d'un constituant-clé et l'on rapporte la conversion à ce constituant; on écrit alors:

$$n_i = n_{i_0} (1 - X_i)$$

le taux de conversion; le % de réactif qui a été transformé sera alors:

$$X_i = \frac{n_{i_0} - n_i}{n_{i_0}}$$

On peut encore définir l'avancement d'une façon plus générale en le rapportant au nombre total de moles d'actifs initialement présentes, on écrit alors:

$$\boxed{n_i = n_{i_0} + n_0 X}$$

avec $n_0 = n_{i_0}$

1.2.2. Expression du volume réactionnel et des concentrations

Il conviendra de distinguer entre les réactions en phase liquide où le volume varie peu en général et les réactions en phase gazeuse où l'on peut avoir des variations considérables de volume donc de densité.

1.2.2.1. Variation du volume réactionnel

Cette variation est due au changement de température, de pression et de composition (en fait les 3 sont liées). Le volume total sera la somme des volumes des actifs et des inertes.

* Phase liquide

On supposera négligeable toute dilatation ou compressibilité; on arrive à une expression du type

$$\boxed{V = V_0 (1 + \alpha X)}$$

où α est le coefficient de dilatation qui s'écrit

$$\boxed{\alpha = \frac{\Delta V}{V_0 \frac{n_I}{n_0}}}$$

* Phase gazeuse

$$\boxed{V = V_0 \beta (1 + \alpha X)}$$

β = coefficient de compressibilité

$$\beta = \frac{T}{T_0} \frac{P_0}{P}$$

1.2.2.2. Expression des concentrations en phase liquide:

Pour un constituant i , on a

$$C_i = \frac{n_i}{V}$$

$$\text{or } n_i = n_{i_0} + \sum_i n_i \nu_i X = n_{i_0} + n_0 \nu_i' X$$

$$\text{et } V = V_0 (1 + \alpha X)$$

il vient alors

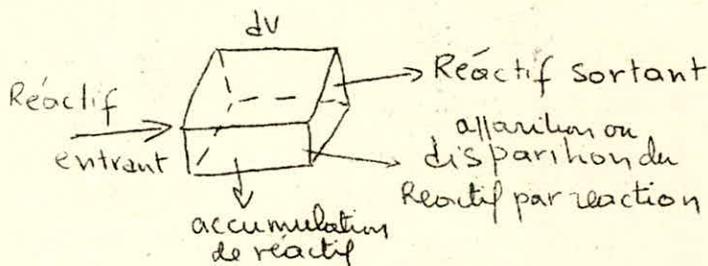
$$C_i = \frac{n_{i_0} + n_0 X \nu_i'}{(1 + \alpha X) V_0}$$

on suppose $\beta = 1$

1.3. Les bilans en génie chimique:

Le point de départ de tout travail de conception est un bilan de matière et un bilan d'énergie que l'on écrit pour pour chaque réactif ou produit.

Pour chaque élément de volume d'un réacteur, on peut écrire



en d'autres termes; soit pour la matière, soit pour l'énergie, tout bilan s'écrira de façon générale:

$$\overline{\left(\begin{array}{c} \text{ce qui} \\ \text{entre} \end{array} \right)} = \overline{\left(\begin{array}{c} \text{ce qui} \\ \text{sort} \end{array} \right)} + \overline{\left(\begin{array}{c} \text{ce qui dispa-} \\ \text{rait ou apparait} \end{array} \right)} + \overline{\left(\begin{array}{c} \text{ce qui} \\ \text{s'accumule} \end{array} \right)}$$

Ce bilan global est valable quelque soit le type d'appareil. Cependant, suivant le réacteur utilisé et le régime de travail, il y aura des termes qui s'annuleront. de même, il arrive parfois que l'on fasse un bilan différentiel ou bien un bilan sur tout l'appareil.

2.1. Introduction : la modélisation en Génie Chimique.

Il est d'usage courant en G.C. (comme dans d'autres disciplines d'ailleurs) de construire des modèles mathématiques pour décrire le fonctionnement d'appareils réels en les ramenant aux modèles ainsi élaborés.

Dans la pratique, ces appareils idéaux, ne décrivent pas exactement les appareils industriels, mais ils permettent de les mettre en équation et de les cerner parfois de très près.

2.2. Ecoulement idéal :

Il existe 2 types extrêmes d'écoulements idéaux sur la base desquels sont construits 2 modèles principaux de réacteurs.

2.2.1. Réacteur à écoulement piston:

Ce qui caractérise ce réacteur, c'est l'absence totale d'intermélangeage dans la direction de l'écoulement. Toutes les grandeurs seront constantes sur une section droite. La condition nécessaire et suffisante pour avoir un écoulement piston est l'existence d'un même temps de séjour pour tous les éléments de fluide.

2.2.2. Réacteur parfaitement agité: description.

Les réactifs sont amenés en continu et agités de façon à avoir un bon macromélangeage.

La composition est alors uniforme dans tout le réacteur et les produits sont évacués en continu.

La composition à la sortie est alors la même qu'à l'intérieur. Cette uniformité des concentrations à l'intérieur de l'appareil nous amène à faire un bilan de matière global.

2.2.3. Equation caractéristique:

11

Elle permet de trouver pour un débit donné l'avancement qu'on peut avoir ou bien, pour un avancement et un débit donné, le volume de réacteur nécessaire. Cette équation s'écrit

$$\frac{X}{V} = \frac{r}{\phi_0} = \frac{r}{Q_0 C_0}$$

* Temps de passage

C'est le temps nécessaire pour traiter un volume de réactif égal au volume du réacteur

$$\tau = \frac{V}{Q_0} = \frac{C_0 X}{r}$$

Si on avait déjà une conversion non nulle

à l'entrée, on aura:

$$\tau = \frac{(X_s - X_e) C_0}{r}$$

2.4. Associations de réacteurs parfaitement agités:

Dans le but d'accroître la conversion ou d'éliminer un produit indésirable, on met ensemble des batteries de réacteur de même type ou de type différent, soit en série, soit en parallèle.

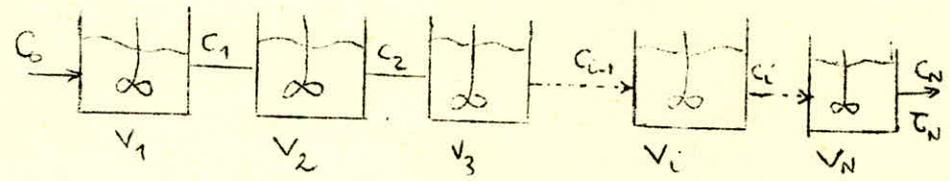
** Association en série

Si on met en série des réacteurs parfaitement

agitée cette chaîne formera un réacteur étagé.

Nous supposons que l'on a un mélange parfait (donc concentration uniforme dans tout l'appareil) et l'on a pas variation de densité.

Pour une réaction du 1er ordre irréversible, on se propose de calculer l'avancement atteint à la sortie du dernier appareil de la cascade. Les étages travaillent tous à la même température.



Pour le ième réacteur, l'équation caractéristique donnera:

$$\begin{cases} \tau_i = C_0 \frac{x_i - x_{i-1}}{r} = C_0 \frac{x_i - x_{i-1}}{k C_i} \\ C_i = C_{i-1} - C_0 (x_i - x_{i-1}) \end{cases}$$

d'où

$$\tau_i = \frac{C_{i-1} - C_i}{k C_i} \text{ donc}$$

$$C_i = \frac{C_{i-1}}{1 + k \tau_i}$$

Si on suppose un débit constant, alors

$$\tau_i = \frac{V_i}{Q_0} \text{ on a donc}$$

$$C_1 = \frac{C_0}{1 + k \tau_1}$$

$$C_2 = \frac{C_1}{1 + k \tau_2}$$

$$C_i = \frac{C_{i-1}}{1 + k \tau_i}$$

$$C_N = \frac{C_{N-1}}{1 + k \tau_N}$$

$$C_1 C_2 \dots C_N = \frac{C_0 C_1 C_2 \dots C_{N-1}}{(1 + k \tau_1)(1 + k \tau_2) \dots (1 + k \tau_N)}$$

$$C_N = \frac{C_0}{(1+k\tau_1)(1+k\tau_2)\dots(1+k\tau_N)}$$

Si tous les réacteurs sont identiques, l'avancement final sera:

$$C_N = \frac{C_0}{\left(1 + \frac{k}{N} \tau_N\right)^N} \quad \tau_N = N\tau_i$$

$$(1+k\tau_i) = \left(\frac{C_0}{C_N}\right)^{1/N} \text{ d'où}$$

$$\tau_i = \frac{1}{k} \left[\left(\frac{C_0}{C_N}\right)^{1/N} - 1 \right] \text{ ou encore}$$

$$\tau_N = \frac{N}{k} \left[\left(\frac{C_0}{C_N}\right)^{1/N} - 1 \right]. \text{ la fonction de l'avancement, on aura avec } C_N = C_0(1-X_N)$$

$$\tau_N = \frac{N}{k} \left[\left(\frac{1}{1-X_N}\right)^{1/N} - 1 \right]$$

Dans une cascade de réacteurs agités, la concentration en réactif diminue progressivement de l'entrée à la sortie, ainsi que cela se passe dans un réacteur piston.

Cela suggère, que le comportement de la cascade approche celui du réacteur piston.

Et effectivement, on démontre que lorsque le nombre de réacteur de la cascade est très grand (en théorie, infini) celle-ci est équivalente au point de vue performances (avancement), à un réacteur piston de même volume.

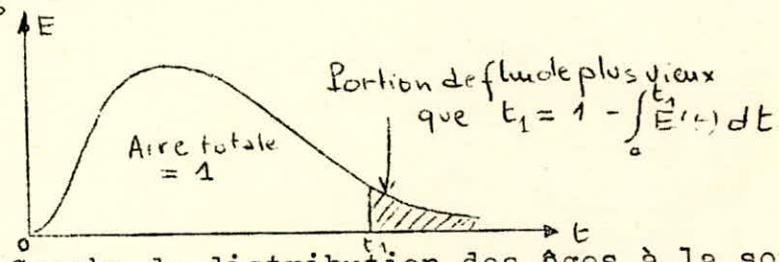
ECOULEMENT NON IDEAL

3.1. Distribution du temps de séjour des molécules dans un réacteur.

3.1.1. Fonction de DTS :

A l'intérieur d'un réacteur réel, les molécules empruntent des chemins différents et quand elles arrivent à la sortie, elles ont forcément séjourné des temps différents dans l'appareil : elles n'ont donc pas le même "âge"; on aura donc une distribution des âges et ceux-ci sont mesurés à la sortie, on aura directement la distribution des temps de séjour de ces molécules. Cette distribution est représentée par la fonction E(t). On aura donc logiquement

$$\int_0^{\infty} E(t) dt = 1$$



Courbe de distribution des âges à la sortie.

3.1.2. Autres courbes de distribution et détermination expérimentale de ces différentes courbes.

Pour connaître le degré de non idéalité d'un écoulement, on doit déterminer la courbe E.

Pour cela, on emploie une méthode très largement utilisée par la physique : on excite le système à l'aide d'une stimulation (qui ne doit pas modifier le régime d'écoulement) et on exprime sa réponse qui nous donnera l'information désirée. Ici, la stimulation utilisée est un traceur injecté à l'entrée du réacteur et la réponse une courbe donnant la concentration du traceur quittant le réacteur en fonction du temps.

Traceurs utilisés :

On utilise des substances facilement détectables par mesure d'une de leurs propriétés physiques (conductivité, couleur, ...). Ce sera en général:

- Des substances radio-actives.
- Des substances colorés.
- Des électrolytes forts.

3.2. Réponses aux différentes stimulations :

3.2.1. Réponse à une injection impulsien de Dirac :

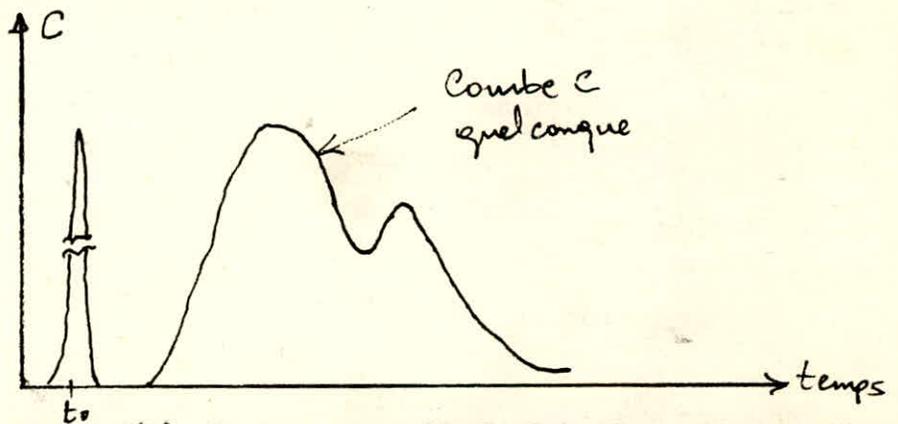
L'impulsien de Dirac ou fonction δ est définié ainsi :
 Si on injecte le traceur à l'instant $t=t_0$, alors est définie à l'instant $t=t_0$ et nulle partout ailleurs.
 Sa surface est égale à 1 et sa largeur est nulle.

$$\delta(t-t_0) = \infty \text{ à } t = t_0$$

$$\delta(t-t_0) = 0 \text{ à } t \neq t_0$$

$$\int_0^{\infty} \delta(t-t_0) = 1.$$

La réponse à la sortie du réacteur à une impulsion de Dirac est appelée courbe $C(t)$.

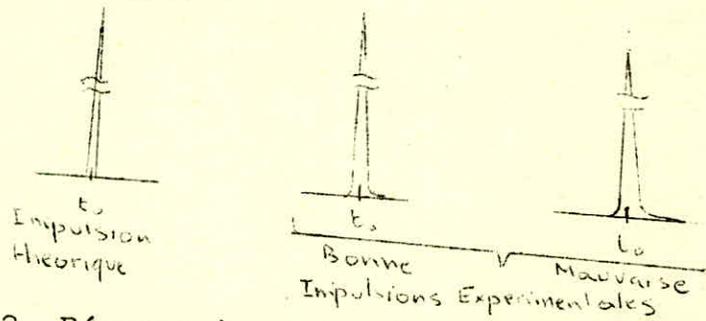


La courbe $C(t)$ n'est pas normée, c'est-à-dire que sa surface n'est pas égale à 1.

La courbe $C(t)$ mesure le rapport des concentrations à la sortie, soit c , à celle obtenue en diluant uniformément la quantité de traceur injectée, soit c_0 .

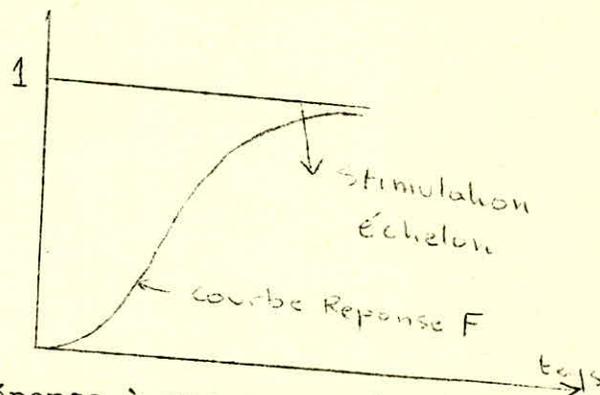
$$C = \frac{c}{c_0}$$

Remarque:



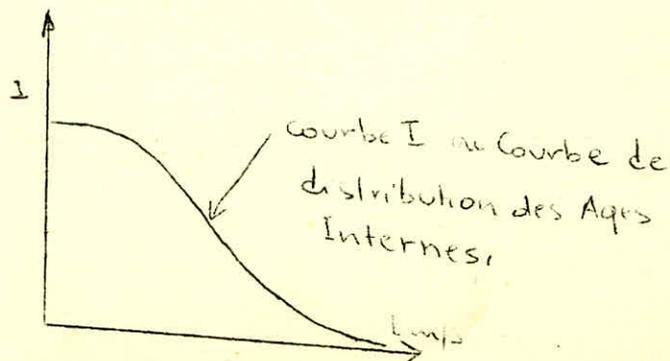
3.2.2. Réponse à un échelon de concentration:

A l'instant initial, on injecte une quantité de traceur sous forme d'un échelon unité à l'entrée. La courbe réponse s'appelle la courbe F .



3.2.3? Réponse à une purge-échelon:

Quand on interrompt brusquement une injection permanente et établie de traceur, on obtient une stimulation appelée purge-échelon. La réponse à une telle stimulation est la courbe I .



Coordonnées réduites: On réduit l'abscisse t par le temps de passage $\tau = \frac{V}{Q}$ dans le réacteur.

On pose $\theta = \frac{t}{\tau}$

Pour les courbes dont la surface est différente de 1, on divise les coordonnées par la surface S de la courbe pour obtenir une surface unité, donc une courbe normée.

On écrira alors les diverses fonctions en coordonnées réduites

$$E(\theta) = \tau E(t)$$

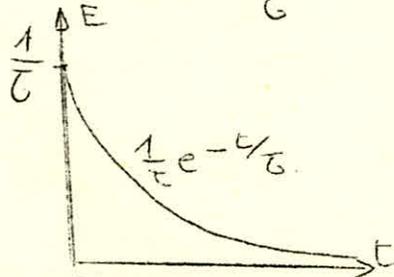
$$I(\theta) = \tau I(t)$$

$$C(\theta) = \tau C(t)$$

3.3. Expression de ces différentes fonctions pour le réacteur parfaitement agité:

Etant donné qu'on a un macromélange parfait, l'uniformité de composition impliquera pour chaque molécule une égale probabilité de sortie. Il en résulte une distribution des temps de séjour exponentielle, caractéristique d'un réacteur parfaitement agité.

On détermine la courbe C en faisant un bilan sur le traceur. On obtient alors $C = e^{-t/\tau} = e^{-\theta} = E(\theta)$ ou bien $E(t) = \frac{1}{\tau} e^{-t/\tau}$



3.4. Relations entre ces différentes fonctions:

On procède toujours par bilans sur le traceur à un instant donné. On aboutit alors à la relations suivantes

$$F(\theta) = \int_0^{\theta} E(t) dt$$

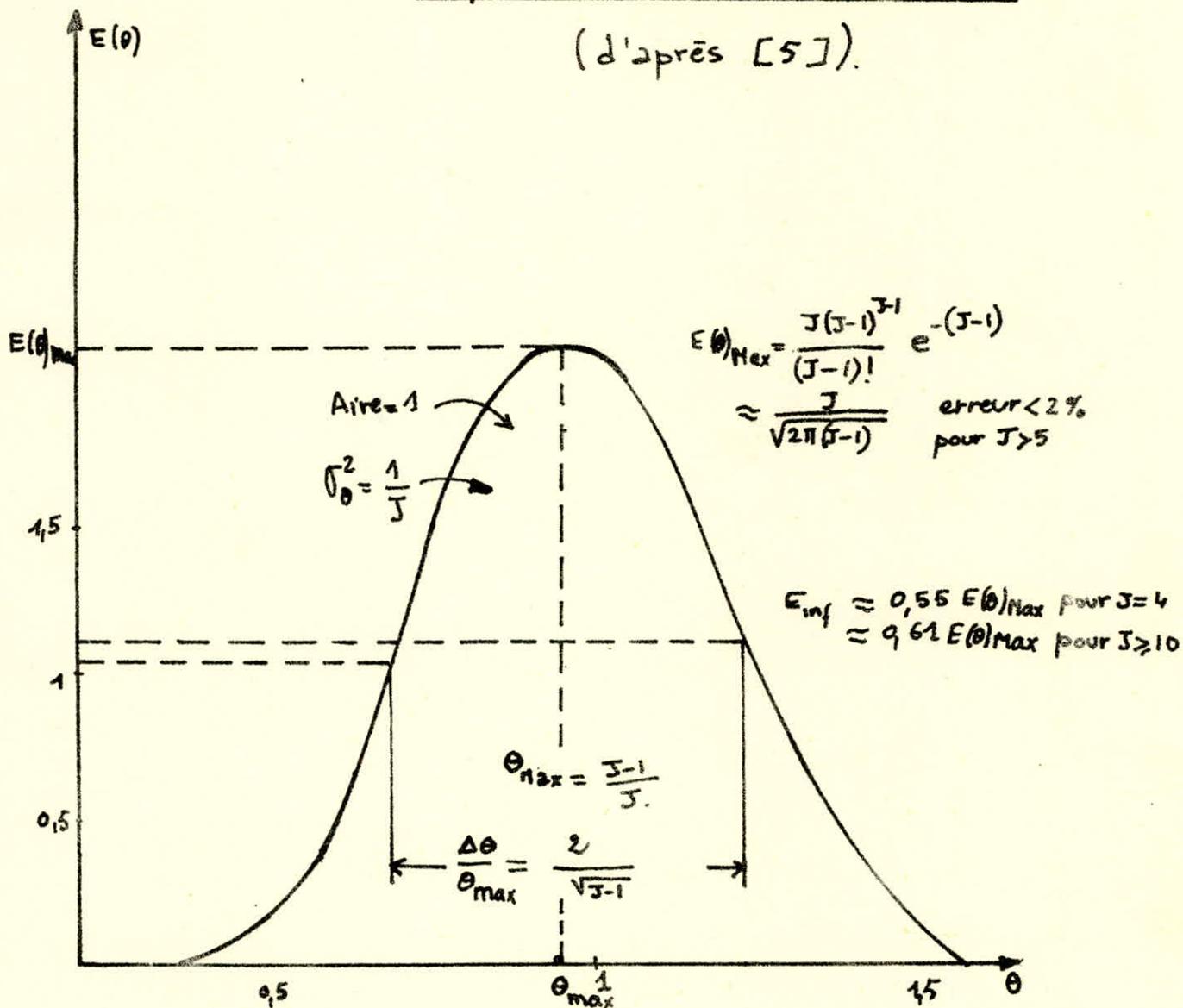
$$E(\theta) = C(\theta)$$

Remarque: La courbe $E(t)$ sera égale à la courbe $C(t)$ normée, car on considère la cascade de réacteurs comme un réacteur clos à la diffusion (closed vessel).

$$E(t) = \frac{C(t)}{\int_0^{\infty} C(t) dt}$$

Propriétés de la courbe $E(\theta)$ vs θ

(d'après [5]).



Courbe $E(\theta)$ vs θ
 (Détermination graphique de J)

3.5. Utilisation des différentes courbes de distribution:

3.5.1. Paramètres caractéristiques d'une distribution:

Une fonction de distribution est toujours caractérisée par 2 paramètres importants:

3.5.1.1. La moyenne ou centre de la distribution:

Si $f(x)$ est la fonction de distribution, la moyenne sera définie par

$$\bar{t} = \int_0^{\infty} x f(x) dx$$

Pour la fonction E , on aura

$$\bar{t} = \int_0^{\infty} t E(t) dt$$

Pour une courbe expérimentale, on emploiera la formule approchée:

$$\bar{t} = \sum_i t_i E_i(t) \Delta t$$

3.5.1.2. La variance:

Ce paramètre mesure l'étalement ou l'étendue de la distribution. Une faible valeur de la variance signifiera que les valeurs de la fonction sont distribuées étroitement autour de la moyenne. Elle est définie par:

$$\sigma^2 = \int_0^{\infty} (t - \bar{t})^2 E dt = \int_0^{\infty} t^2 E dt - \bar{t}^2$$

soit approximativement $\sigma^2 = \sum_i t_i^2 E_i \Delta t - \bar{t}^2$

Variance réduite: $\sigma^2_e = \frac{\sigma^2}{\bar{t}^2}$

3.5.2? Détection des zones de stagnation et de court-circuit.

Dans un écoulement réel, si le mélangeage est imparfait, il se crée des zones de stagnation ou volumes morts: ce sont des zones qui échangent notamment avec une vitesse très faible avec le reste du fluide. Ceci a pour effet de diminuer la conversion.

Evaluation des volumes morts:

On considère donc qu'il y a un volume V_m dans le réacteur inaccessible au fluide. Si l'écoulement était idéal, le temps de passage $\tau = \frac{V}{Q}$ serait égal à la moyenne de la courbe de distribution normée, soit $\bar{t} = \tau$

comme il existe un volume mort, la courbe présentera une longue queue due au traceur

qui est resté dans le volume mort et qui diffuse lentement, la surface sera alors plus grande sous la courbe et donc

$$\bar{\tau} = \frac{m_1}{S} \quad m_1, \text{ moment d'ordre 1}$$

sera inférieure à τ

Le volume accessible au fluide sera: $V - V_m$
et $\tau = \frac{V}{Q} \Rightarrow 1 - \frac{m}{V} = \frac{\bar{\tau}}{\tau}$

Evaluation des court-circuits:

Il existe aussi surtout dans les réacteurs à garnissage des court-circuits: le fluide traverse très rapidement le réacteur en se frayant des chemins préférentiels. La surface sous la courbe C sera alors plus petite que celle prévue théoriquement. Donc $\bar{\tau}$ sera supérieur à τ

$$\bar{\tau} = \frac{V}{Q - Q_c}$$

Q_c : débit de court-circuit

$$\frac{\tau}{\bar{\tau}} = \frac{V}{Q} \cdot \frac{Q - Q_c}{V} = 1 - \frac{Q_c}{Q}$$

Le débit accessible au détecteur, $Q - Q_c$ sera inférieur au débit réel.

La fonction Intensité:

L'estimation des courbes de réponse d'un modèle de courant se fait graphiquement d'une façon rapide en utilisant le graphe de la fonction Intensité $\lambda(t)$ ainsi définie

$$\lambda(t) = \frac{E(t)}{1 - F(t)}$$

Soit en temps réduit

$$\lambda(\theta) = \frac{E(\theta)}{I(\theta)} = \frac{E(\theta)}{1 - F(\theta)}$$

On aura donc $\lambda(\theta) = \tau \lambda(t)$

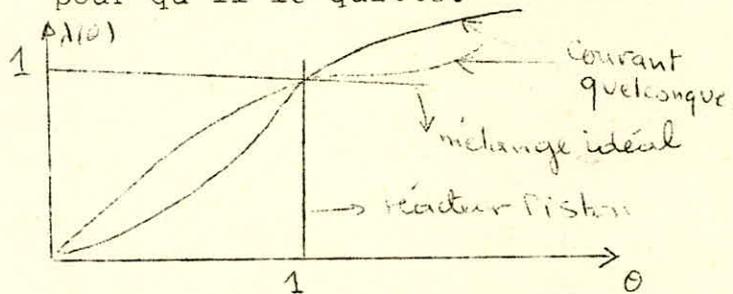
$\lambda(t)$ est une fonction de distribution: elle représente la probabilité pour qu'une particule d'âge t sorte de l'appareil pendant un intervalle de temps dt .

- Pour un modèle de mélange idéal $\lambda(t)$ est constante puisque la probabilité de sortie des particules de l'appareil ne dépend pas de leur histoire.

- Pour des courants dont la distribution des âges internes ne présente pas de particularités,

(t) sera une fonction monotone croissante.

- Cette croissante s'explique par le fait que plus longtemps un élément de fluide séjourne dans le réacteur, plus grande est la probabilité pour qu'il le quitte.



Forme de la fonction Intensité pour les zones de stagnation et de court-circuit:

(1) Zones de stagnation

On observera d'abord une croissance de la fonction lorsque la masse principale de fluide quitte l'appareil.

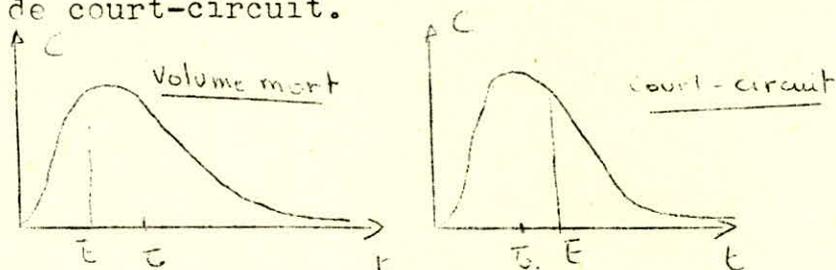
Après l'écoulement du gros du courant, la probabilité pour que les particules sortent du réacteur va en diminuant vu qu'elles proviennent des zones où l'échange de matière se fait très lentement.

La fonction Intensité passera par un maximum puis commencera à décroître. Mais au cours du temps les particules restées dans les volumes morts commenceront à quitter l'appareil et la probabilité pour qu'elles sortent du système sera de

nouveau d'autant plus grande qu'elles séjournent plus longtemps: la fonction recommencera alors à croître.

(2) Court-circuit:

On aura une allure analogue, la seule différence provenant des volumes de fluide en état de court-circuit.



3.5.3. Calcul de la conversion.

C'est le paramètre le plus important à mesurer, mais aussi le plus difficile dans où l'on n'a pas une réaction du 1er ordre.

Pour déterminer la conversion dans un réacteur réel, on prend un réacteur idéal qui donne la même courbe de DTS et si l'on a affaire à un processus linéaire, alors la valeur trouvée sera la même dans les deux cas.

Pour des réactions du 1er ordre de n'importe quel type, on a alors l'expression de la conversion moyenne

$$\bar{X} = \int_0^{\infty} X(t) E(t) dt$$

Pour une réaction simple irréversible, on aura

$$X(t) = 1 - e^{-kt}$$

$$\text{d'où } \bar{X} = \int_0^{\infty} (1 - e^{-kt}) E(t) dt$$

soit approximativement

$$\bar{X} = \sum_{i=1}^{n} (1 - e^{-kt_i}) E(t_i) \Delta t$$

Donc une réaction du 1er ordre, la conversion moyenne ne dépendra que du temps de réaction et pourra être déterminée à partir des CDTS rendant compte de l'état de macromélange de fluide.

3.5.4. Conversion pour des réactions d'ordre supérieur à 1 : processus non linéaires

Quand la réaction n'est pas du 1er ordre, on

ne peut utiliser directement les informations données par un traceur pour déterminer la conversion. En effet dans l'équation qui relie la conversion au temps, on aura des termes de concentration ce qui introduit des inconnues.

Et, contrairement aux processus linéaires, à une même distribution des temps de séjour peuvent correspondre des avancements différents. La conversion dépendra alors non seulement du temps de réaction, mais aussi de l'état de dilution du mélange réactionnel. Donc pour atteindre ce paramètre, il faut adjoindre à l'information donnée par la DTSE l'état de micromélange du fluide. Nous n'insisterons pas, ici, sur cette notion importante mais qui n'entre pas directement dans le cadre de notre travail.

Le modèle des mélangeurs en cascade

Il existe deux modèles de base à un paramètre qui décrivent de façon assez précise la circulation d'un fluide dans certains réacteurs réels.

4.1. Modèle diffusionnel à dispersion axiale:

L'écoulement est un écoulement piston compliqué d'un mélange retour ou dispersion axiale qui est régit par une loi de diffusion.

Modèle des mélangeurs en cascade:

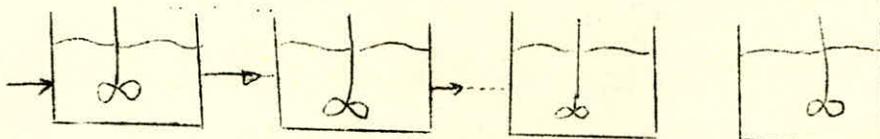
Nous insisterons plus sur ce modèle largement utilisé pour représenter un écoulement réel.

Le fluide passe à l'intérieur d'une série de réacteurs parfaitement agités avec absence d'intermélangeage. Le paramètre du modèle est le nombre N de réacteurs de la cascade.

4.2.1. Courbe réponse à une stimulation:

Elle est facilement obtenue étant donné que les problèmes de conditions aux limites, de l'injection de traceur, et des mesures ne se posent pas contrairement au premier modèle.

- Représentation mathématique du modèle à l'aide de la courbe C :



Le volume total s'écrit $M = N V_i$, V_i étant le volume d'un réacteur.

Le temps de passage total est : $\tau = \frac{NV_i}{Q}$

La description mathématique du modèle se fera à l'aide de N équations différentielles linéaires du 1er ordre, obtenues en faisant un bilan matière sur chaque réacteur.

Si on suppose qu'il n'y a pas de réaction chimique, le bilan sur le i ème réacteur s'écrira:

$$Q C_{i-1} = Q C_i + V_i \frac{dC_i}{dt} \quad \text{soit encore}$$

$$\frac{V}{N} \frac{dC_i}{dt} = Q (C_{i-1} - C_i) \quad \text{donc on aura}$$

le système :

$$\boxed{\frac{V}{N} \cdot \frac{dC_i}{dt} = Q (C_{i-1} - C_i) \quad i=1 \text{ à } N}$$

Faisons une injection type impulsion de Dirac d'équation $C_0 = \delta(\theta)$

$$\text{Passons en variables réduites: } C_i = \frac{C_i}{C_0}$$

$$\theta = \frac{t}{\tau}$$

$$\text{Le système devient } \begin{cases} C_{i-1} = C_i + \frac{1}{N} \cdot \frac{dC_i}{d\theta} \\ C_0 = \delta(\theta) \end{cases}$$

On résout ce système différentiel par la méthode de Laplace. Il vient alors

$$C_0 = E_0 = \frac{N^N \theta^{N-1}}{(N-1)!} e^{-N\theta}$$

D'où la courbe E

$$E = \frac{E_0}{\tau} = \frac{E_0}{N\tau C_i} = \frac{N^N \theta^{N-1}}{(N-1)! \tau} e^{-N\theta}$$

$$N=1 \quad E = \frac{1}{\tau} e^{-t/\tau}$$

$$N=2 \quad E = \frac{4t}{\tau^2} e^{-2t/\tau}$$

$$N=3 \quad E = \frac{27}{2} \frac{t^2}{\tau^3} e^{-3t/\tau}$$

$$N=4 \quad E = \frac{108 t^3}{3 \tau^4} e^{-4t/\tau}$$

On obtient ainsi un réseau de courbes pour différentes valeurs de N.

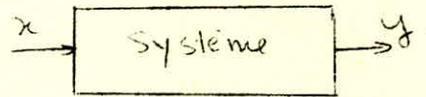
Ce graphe permettra d'estimer le nombre de réacteurs N à partir de la variance de la courbe correspondante.

4.3. DTS dans une cascade de réacteurs de volumes inégaux:

On atteint ces carbés théoriques soit par la méthode utilisée précédemment, soit par la notion de fonction de transfert d'un système.

4.3.1. Fonction de transfert:

Considérons un système auquel nous appliquons un signal d'entrée x et soit y le signal de sortie.



Soit $X = \mathcal{L}(x)$ et $Y = \mathcal{L}(y)$ les Transformés de Laplace de $x(t)$ et $y(t)$. La fonction de transfert est.

$$G = \frac{Y}{X}$$

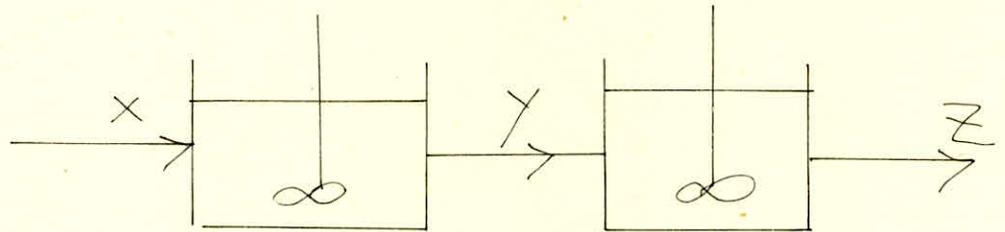
4.3.2. Application au calcul des CDTs:

4.3.2.1. Cas de deux réacteurs inégaux de volume V_1 et V_2 :

Considérons le cas de deux réacteurs agités de volumes V_1 et V_2 en série. Le temps de passage ou de séjour (puisque l'on considère $\alpha=0$ et $\beta=1$) dans chacun d'entre eux est :

$$\tau_1 = V_1/Q \text{ et } \tau_2 = V_2/Q.$$

Le signal d'entrée est une impulsion de Dirac $\delta(t)$



Les bilans matière donnent:

$$\begin{cases} Qx = Qy + V_1 \frac{dy}{dt} \Rightarrow x = y + \tau_1 \frac{dy}{dt} \\ Qy = Qz + V_2 \frac{dz}{dt} \Rightarrow y = z + \tau_2 \frac{dz}{dt} \end{cases}$$

soit $\mathcal{L}(x) = \mathcal{L}[\delta(t)] = 1$.

La fonction de transfert du premier réacteur pris seul est :

$$G_1 = Y/X = \frac{1}{1 + \tau_1 p}$$

Pour le 2^{ème} réacteur on aura

$$G_2 = Z/Y = \frac{1}{1 + \tau_2 p}$$

Or pour tout le système, la fonction de transfert s'écrira $G = G_1 G_2$

soit

$$G = \frac{1}{(1 + \tau_1 p)(1 + \tau_2 p)}$$

$$G = \frac{-\tau_1}{\tau_2 - \tau_1} \cdot \frac{1}{1 + p\tau_1} + \frac{\tau_2}{\tau_2 - \tau_1} \cdot \frac{1}{1 + p\tau_2}$$

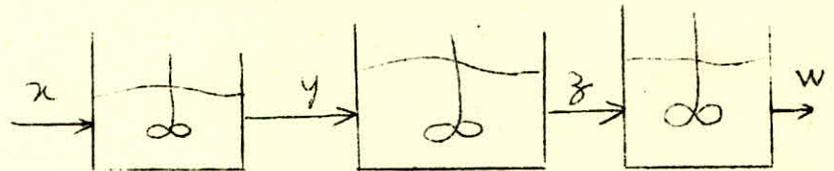
$$G = \frac{1}{\tau_1 - \tau_2} \left[\frac{1}{\tau_2 + p} - \frac{1}{\tau_1 + p} \right]$$

A l'aide des tables d'images, on trouve facilement que :

$$\mathcal{L}^{-1}(G) = E(t) = \frac{1}{\tau_1 - \tau_2} \left[e^{-t/\tau_1} - e^{-t/\tau_2} \right]$$

Or l'inverse de G n'est autre que la courbe $E(t)$ puisque x, y, z représentent les concentrations à la sortie de chacun des réacteurs.

Cas de trois réacteurs inégaux:



On arrive de même (toujours avec une impulsion de Dirac) à la fonction de transfert du système qui s'écrira :

$$G = \frac{1}{(1 + \tau_1 p)(1 + \tau_2 p)(1 + \tau_3 p)}$$

Les calculs deviennent plus compliqués. Nous décomposons G en éléments simples et l'on arrive à une fonction E qui s'écrit :

$$x'(t) = \frac{1}{(\tau_1 - \tau_3)(\tau_1 - \tau_2)(\tau_2 - \tau_3)} \left[(\tau_1 - \tau_3) e^{-t/\tau_1} - (\tau_1 - \tau_2) e^{-t/\tau_2} + (\tau_2 - \tau_3) e^{-t/\tau_3} \right]$$

4.3.2. Réacteurs égaux:

La fonction de transfert nous permettra de retrouver les résultats énoncés un peu avant grâce à un bilan de matière:

• 2 réacteurs égaux:

$$\text{On a } G = \frac{1}{(1 + \tau A)^2} = \frac{1}{\frac{\tau^2}{4} \left[\frac{2}{\tau} + A \right]^2}$$

$$\Rightarrow \mathcal{L}^{-1}(G) = E = \frac{4t}{\tau^2} e^{-2t/\tau}$$

• 3 réacteurs égaux:

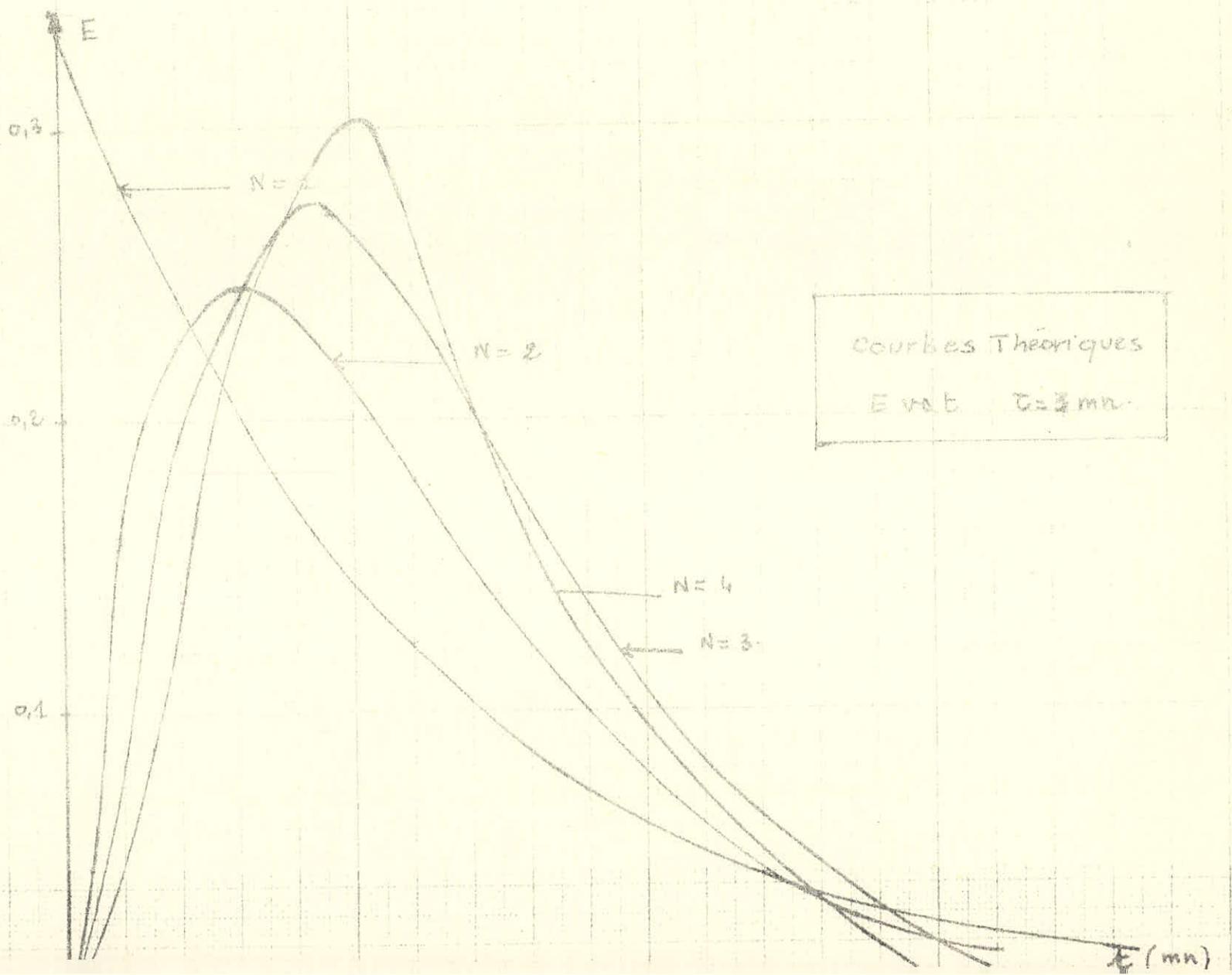
$$G = \frac{1}{(1 + \tau A)^3} \Rightarrow E = \frac{27}{2} \frac{t^2}{\tau^3} e^{-3t/\tau}$$

• 4 réacteurs égaux:

$$G = \left(\frac{1}{1 + \tau A} \right)^4 = \frac{1}{\left(\frac{\tau}{4} \right)^4 \left[\frac{4}{\tau} + A \right]^4}$$

$$\Rightarrow \mathcal{L}^{-1}(G) = E = \frac{198}{3} \frac{t^3}{\tau^4} e^{-4t/\tau}$$

(VOIR RESEAU de ces Courbes)



2 ème P A R T I èE

ETUDE PRATIQUE

DESCRIPTION DU MONTAGE EXPERIMENTALE

ET DE L'APPAREILLAGE UTILISE.

D'une façon globale, nous avons repris le réacteur déjà construit auquel, cependant, nous avons fait subir d'importantes modifications, notamment :

- La géométrie des agitateurs ainsi que leur vitesse d'entraînement.
- L'écoulement du fluide qui suit une trajectoire sinu-euse.
- Le réglage et la mesure du débit de l'eau de ville grâce au montage d'un rotamètre.

1. Description générale de l'installation:

Elle se divise principalement en deux parties:

- Le réacteur proprement dit.
- L'appareillage de réglage et d'enregistrement.

1.1. Le réacteur

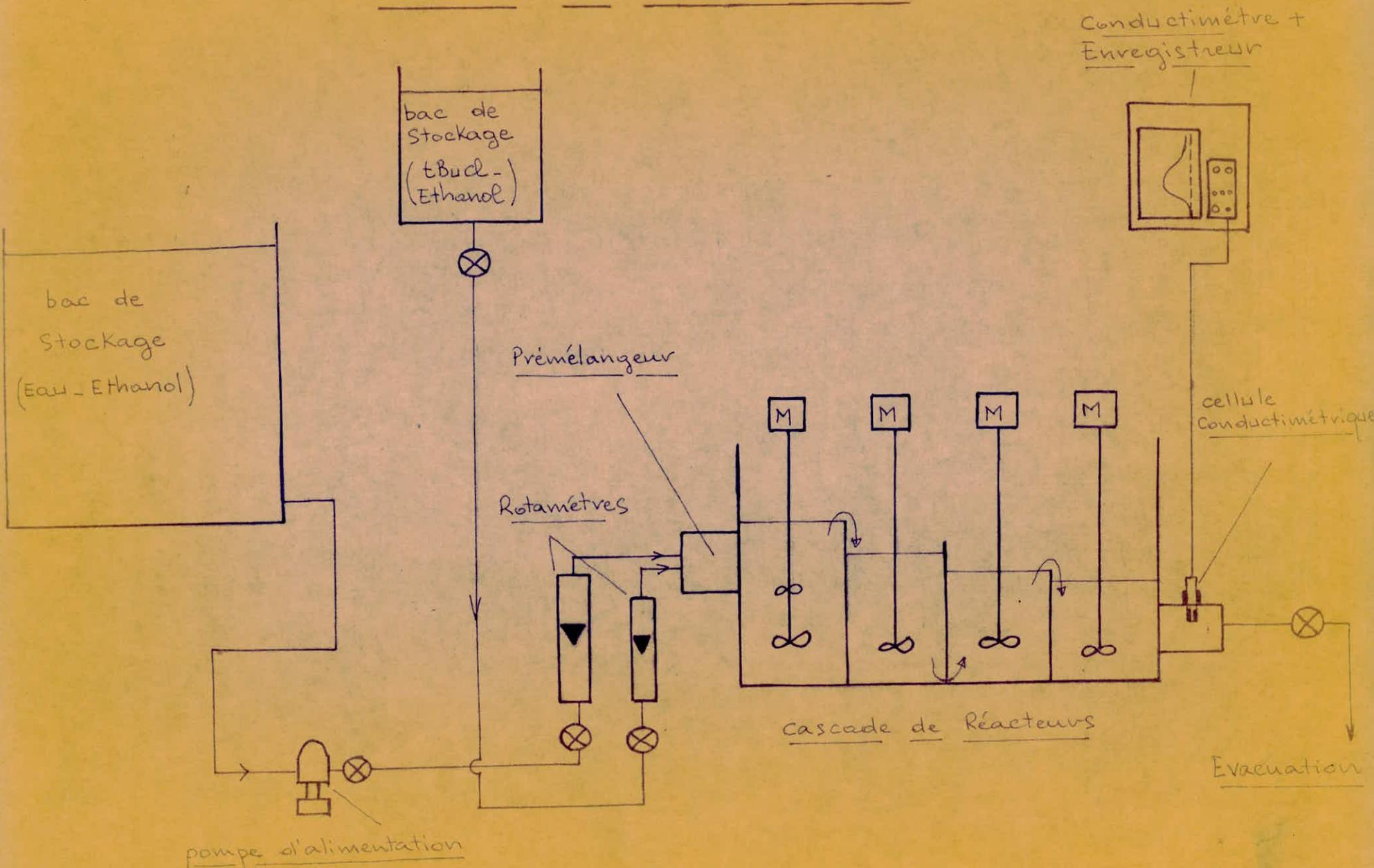
C'est un bac parallépipédique en plexi-glas ouvert à l'atmosphère. Sa contenance est d'environ 60 l. Des rainures permettent de diviser ce bac en 2, 3 ou 4 réacteurs de même volume en série de façon à avoir toujours un volume total égal à 60 l environ.

Ces différents réacteurs sont équipés de chicanes. En outre, l'étanchéité entre eux est assurée par du mastic de vitrier. Pour évaluer le volume géométrique de ces bacs en série, on procède par pesée.

1.1.1. Circulation du fluide à l'intérieur du réacteur:

Le liquide arrive dans le fond du premier bac par un tube en plexiglas collé à la paroi et troué à sa base. Il passe dans le deuxième réacteur grâce à un dé-versoir à bord triangulaire (ce qui réduit la hauteur de liquide au-dessus de

SCHEMA DE L'INSTALLATION



Ensuite, il passe dans le troisième réacteur par le bas du deuxième déversoir qui est légèrement relevé.

Enfin, il arrive dans le quatrième bac par un déversoir.

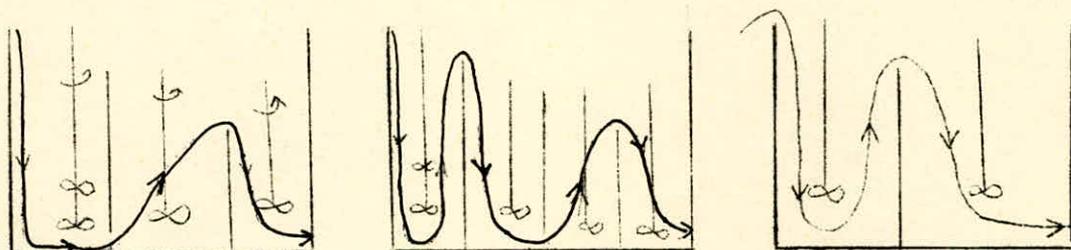


Schéma montrant l'écoulement du fluide dans la cascade de réacteurs en série.

1.1.2. Les cellules d'entrée et de sortie:

Cellules d'arrivée du fluide: c'est un petit parallélépipède de 15 cm^3 en plexiglas. Elle sert seulement de prémélangeur et, vu son petit volume, on n'en tiendra pas compte dans l'interprétation des CDTS du fluide.

Cellule de sortie: Elle est placée au bas du dernier bac et est usinée aussi dans du plexiglas et a un volume de 23 cm^3 . Elle possède un orifice qui permet de recevoir une sonde conductimétrique du type Tacussel CM/02/88G.

1.2. Les appareils de réglage et d'enregistrement:

1.2.1. Réglage et mesure du débit:

Elle se fait à l'aide d'un rotamètre METRIC 35 P qui permet de mesurer jusqu'à des débits de $50/\text{mn}$. Cet appareil nous permet de maintenir un débit constant et d'avoir aussi sa valeur.

1.2.2. Enregistrement du signal de sortie:

Il se fait à l'aide d'un conductimètre TACUSSEL EPL1 relié à la sonde conductimétrique précédente.

Elle se fait à l'aide d'une vanne
3/4 placée à la sortie du bac.

113. Accessoires annexes:

1.3.1. Les moteurs d'entraînement:

On a mis 2 moteurs LEROY-SOMMER
type LST 71-73 tournant à 1500 t/mn. A
l'arbre de chacun d'eux est reliée une
poulie de \varnothing 30 mm qui entraîne par l'in-
termédiaire de deux courroies deux pou-
lies de \varnothing 90 mm solidaires des agitat
teurs. On obtient ainsi une réduction
de vitesse d'une façon simple. Les héli-
ces sont du type "marine" et tournent
à raison de 500 t/mn.

1.3.2. Les agitateurs:

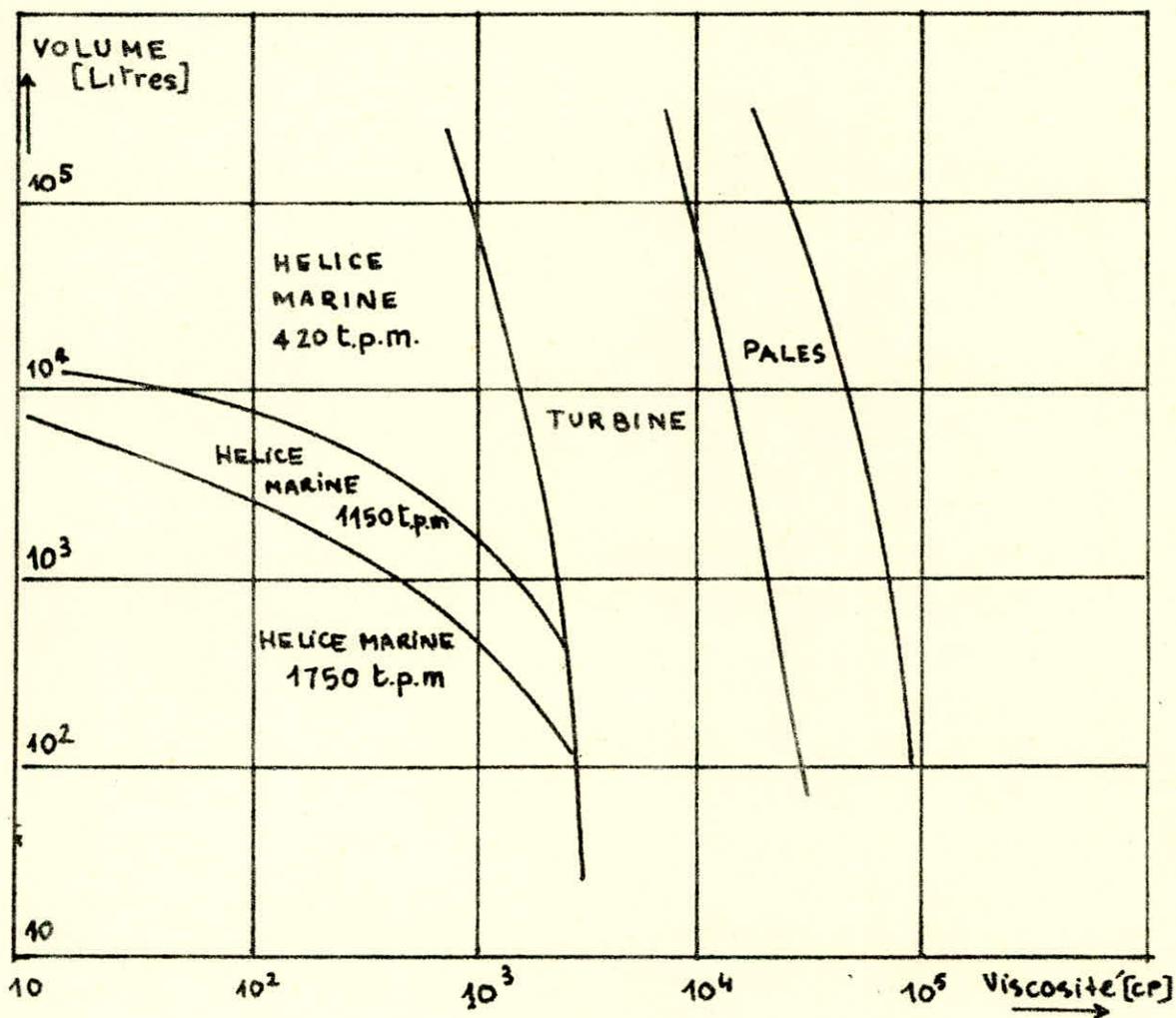
L'agitation en génie-chimique a
pour but essentiel la réalisation d'un
mélange uniforme au point de vue con-
centration ou température. Ceci a pour
conséquence notamment l'amélioration
du transfert de matière ou de chaleur.

Puisque on utilise de l'eau de
ville, on se trouve donc dans le cas des
liquides de faible viscosité et par con-
séquent l'on doit utiliser une hélice
marine.

Position de l'hélice et forme du cou-
rant créé: cet organe d'agitation crée
un courant à prédominance axiale.

Souvent il y a des vortex qui se
créent pour des vitesses trop élevées
et pour éviter cela on a plusieurs
moyens:

- Soit on met des chicanes fixées à
la paroi et dans ce cas on diminue
le volume géométrique.
- Soit on monte l'arbre d'agitation
excentré ou incliné sur la verti-
cale, mais alors dans ce cas on au-



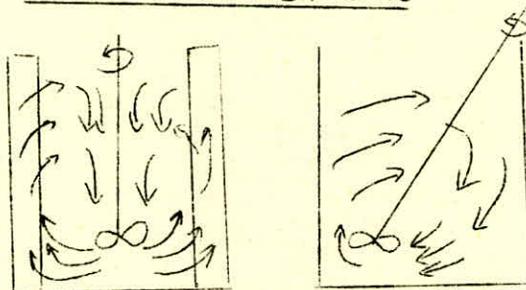
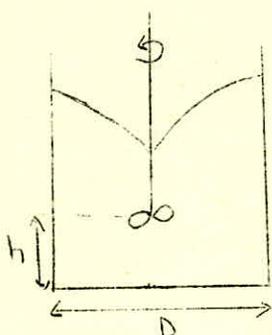
CHOIX DE LA CATÉGORIE D'AGITATEUR

D'après KOEN [6]

ère .

- Enfin, on peut mettre un tube fixe entourant l'arbre.

Forme du courant créée

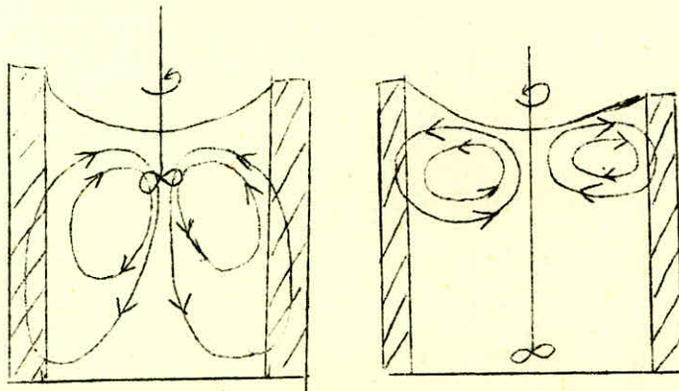


Le choix du matériel d'agitation: Il existe actuellement une grande variété d'agitateurs qu'on classe en quatre catégories :

- Hélices marines
- Turbines
- Agitateurs à pales
- Agitateurs à cisaillement intense

L'agitateur à utiliser dépendra principalement de la viscosité du liquide et du volume à agiter.

Remarque: La hauteur h est importante; si h est grand ou très petit par rapport à D , le profil d'écoulement caractéristique pour une hélice marine ne peut s'installer.



Mauvaises positions d'une hélice

1. Mise au point des appareils :

1.1. L'enregistreur :

On commence par faire le réglage de l'enregistreur en utilisant la notice d'emploi.Ceci sera fait une fois pour toute.

On a ainsi travaillé à la fréquence 5000 Hz et à la sensibilité 500Ω avec la sonde conductimétrique CM/O2/88G dont la constante est égale à 1,71.Le temps de réponse de l'appareil varie suivant le nombre de réacteurs en série;il est le plus grand pour quatre réacteurs et le plus faible quand on a 1 seul.

1.2. Le débit :

On fixe le flotteur à la division correspondante au débit désiré grâce à un étalonnage préalable.

Le rotamètre utilisé permet une très bonne reproductibilité du débit grâce à l'inertie du flotteur qui est très lourd et qui par conséquent oscille très peu.

- Erreur sur le débit :On considère que le flotteur oscille de 0,5 mm autour de sa position d'équilibre.Ceci correspond à une erreur approximative $Q = 0,1$ l/mm.

- Débit maximum atteint : Etant donné la trajectoire du liquide dans la cascade,il n'a pas été possible d'atteindre un débit plus grand que 27l/mm. (sauf dans le cas d'un réacteur) car alors on a une accumulation d'eau importante et le réacteur est "noyé"

1.3. Réglage du niveau dans le dernier réacteur :

C'est le point le plus délicat de la manipulation.Ce réglage se fait manuellement et constamment à l'aide de la vanne placée à la sortie,mais malgré cela durant toute la durée de la mesure,le niveau oscille autour de la position fixée,ce qui introduit une erreur sur le volume du dernier réacteur.

1.4. Injection du traceur :

1.4.1. Choix du traceur :

Nous n'avons pas travaillé avec NaCl comme l'année dernière.

Nous avons opté pour HCl concentré qui est un électrolyte beaucoup plus fort, donc la concentration d'ions H^+ mesurée à la sortie est importante, et ceci permet de travailler avec une sensibilité plus élevée et donc d'avoir de meilleures courbes. La quantité utilisée est aussi plus faible (70 cl). On pourrait craindre que la chaleur de dissolution n'élève la température du bac. Il n'en est rien puisque l'augmentation observée n'est que de $0,5^\circ$, alors qu'au cours d'une journée, la température de l'eau de ville peut passer de 14° à $18^\circ C$.

1.4.2. Injection :

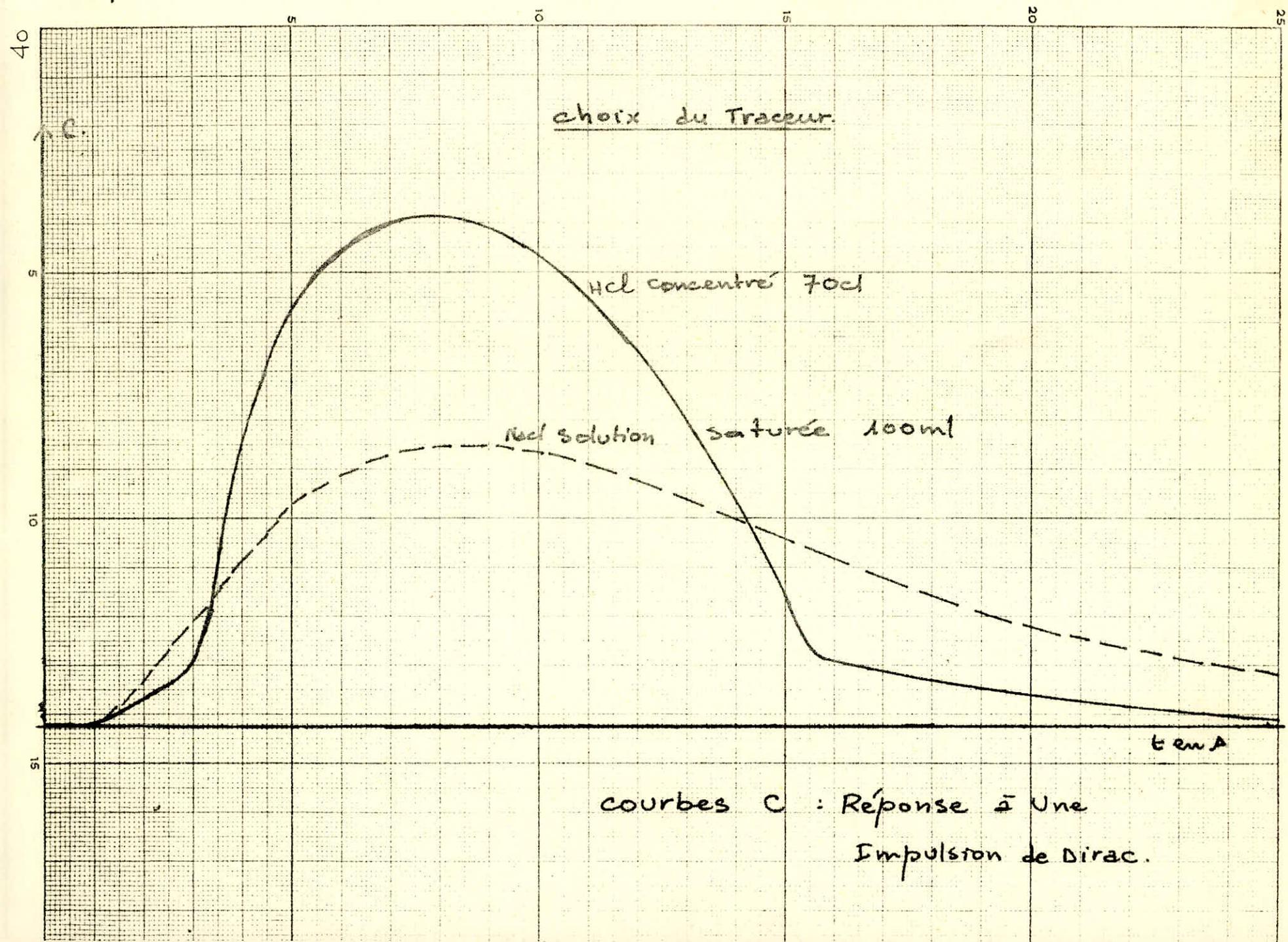
- Elle se fait à la surface à la main à l'aide d'un bécher dans le premier réacteur de la cascade.

Cette méthode présente un grave inconvénient; le traceur est rapidement emporté dans le deuxième réacteur par le courant d'eau ascendant.

- L'injection au fond se fait à l'aide d'un petit cylindre à bout conique en plexiglas dans lequel on envoie de l'air comprimé (1 à 2 bars). Cet appareil est introduit dans le bac et le traceur est alors brusquement chassé par l'arrivée d'air. Cette méthode a le grave inconvénient de perturber l'écoulement par création de vagues pendant un court instant. Pour cette raison, nous ne l'avons employé que dans le cas de deux réacteurs inégaux et de deux réacteurs égaux pour un seul débit.

2. Exemple d'enregistrement d'une courbe C:

1°) On commence par fixer le débit d'eau.

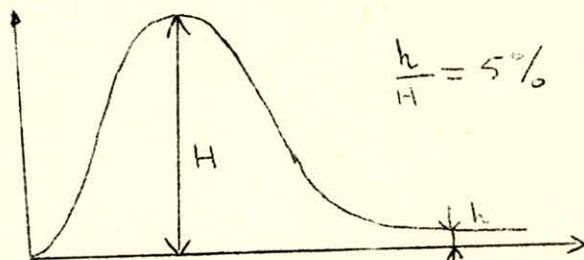


2°) Ensuite, on règle le niveau dans le dernier réacteur.

3°) On met les moteurs en marche et on injecte le traceur en déclenchant en même temps l'enregistreur et le chronomètre. On marque alors sur le papier enregistreur le point qui correspond à l'injection.

Durant toute la mesure on surveillera le niveau dans le dernier réacteur et la marche de l'enregistreur, car parfois la plume se bloque et l'on a alors des paliers, ce qui oblige à refaire l'expérience.

4°) On arrête l'enregistrement quand le rapport des hauteurs correspondant au sommet de la courbe et à un point de la fin de la courbe est égal à 5% environ.



- Remarque: Il est nécessaire de prendre la durée de l'enregistrement car parfois le papier se déroule par saccades. Mais, en général, la vitesse de déroulement a été constante et égale 30mm/mn.

3. Forme des courbes obtenues:

Les courbes expérimentales ne sont pas régulières: elles sont toutes en "dent de scie" et ceci est dû aux bulles d'air microscopiques résultant de l'agitation et qu'il a été impossible d'éliminer.

Elles comportent toutes une "cassure", c'est-à-dire une inflexion assez brutale vers la fin: ceci est peut-être dû à l'inertie de la plume de l'enregistreur (voir figures). Les sommets des courbes C sont aussi parfois horizontaux et ceci peut s'expliquer par un défaut mécanique de l'appareil. Elles présentent toutes de longues queues (surtout pour un réacteur) dues aux volumes morts.

4. Résultats expérimentaux :

4.1. Résultats obtenus l'année précédente:

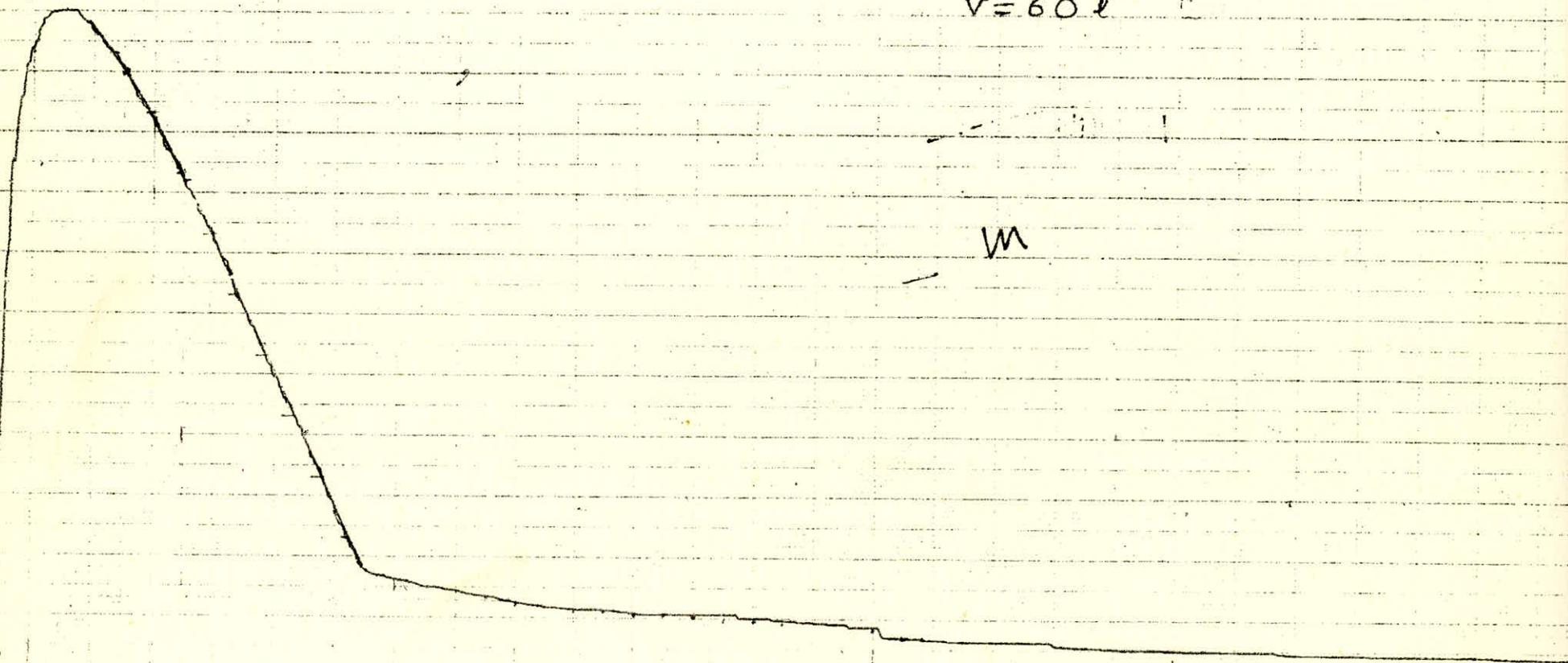
L'enregistrement des courbes C s'est fait à une vitesse de rotation de 750 t/mn avec des agita-

COURBE C

1. RÉACTEUR AGITÉ

$V = 60 \text{ l}$

W



teurs à pâles et avec un écoulement en ~~de~~versoir du fluide.

Deux séries d'expérience ont été faites :

- La première avec un réacteur sans chicanes: les résultats obtenus ont permis d'éliminer d'emblée ce type de réacteur (notamment à cause des vortex et du mauvais mélangeage).

- Pour la deuxième série, deux chicanes ont été installées dans chaque réacteur; les résultats ont été nettement meilleurs:

- Les vortex ont été presque totalement éliminés.

- On n'a plus un écoulement fluvial du fluide (les filets de fluide ^{ne} sont ^{plus} parallèles à la direction de l'écoulement).

L'exploitation des courbes C a permis de déceler l'existence de volumes morts évalués à 10,4 l pour le Réacteur à $Q = 30 \text{ l/mn}$

D'autre part les valeurs de σ obtenues par la méthode de la variance indiquent l'existence de volumes morts bien sûr, mais aussi de court-circuit. Cette dernière notion étant difficile à accepter pour un réacteur sans garnissage, on a déduit que celui-ci était dû à l'injection de traceur à la surface dans le premier réacteur et dont une bonne partie est entraînée vers le deuxième réacteur et par conséquent arrive très vite vers la sortie.

Les difficultés rencontrées ont été principalement:

- l'absence d'appareils de mesure du débit; il a été donc difficile d'avoir des valeurs reproductibles.
- le réglage du niveau dans le dernier bac.

4.2. Résultats obtenus cette année:

Nous avons travaillé à quatre débits pour chaque série de réacteur soit

$$Q_1 = 10 \text{ l/mn}$$

$$Q_2 = 15 \text{ l/mn}$$

$$Q_3 = 20 \text{ l/mn}$$

$$Q_4 = 26,7 \text{ l/mn}$$

Il a été pratiquement impossible d'avoir une valeur plus grande que Q_4 à cause des pertes de charges dues à la trajectoire du fluide dans la cascade de réacteurs.

4.2.1. Exploitation des courbes C :

- Les différentes étapes du calcul:

Une fois la courbe C enregistrée, on commence par calculer sa surface ~~xxx~~ à l'aide d'un planimètre: on répète l'opération plusieurs fois jusqu'à obtenir des résultats reproductibles. La surface est donnée en cm^2 ; il faut alors la transformer en fonction des unités choisies pour les concentrations et les temps (sur le graphe de la courbe C). En ordonnées on a pris une grandeur directement proportionnelle à la concentration, soit $1 \text{ cm} = 1 \text{ mole/l}$. En abscisse, 1 cm représente 20 s .

Ensuite, on trace la courbe $E(t)$ en divisant chaque valeur de la courbe C par la surface.

- Calcul de la moyenne de la distribution: On reprend directement les valeurs de $E = \frac{C}{S}$ calculées précédemment. On choisit un intervalle de temps constant (10 ou 20 s) et on calcule E par l'équation $E = E_i \cdot t_i \cdot \Delta T$

La valeur de la variance est alors déterminée en calculant d'abord l'expression

$$\sigma^2 = \frac{\sum t_i^2 E_i \Delta T}{\sum t_i^2 E_i \Delta T} - \bar{E}^2$$

En général, on a pris $\Delta T = 20 \text{ s}$ ou 10 s suivant les cas. La variance réduite s'écrira donc:

$$\sigma_\theta^2 = \frac{\sigma^2}{\bar{E}^2}$$

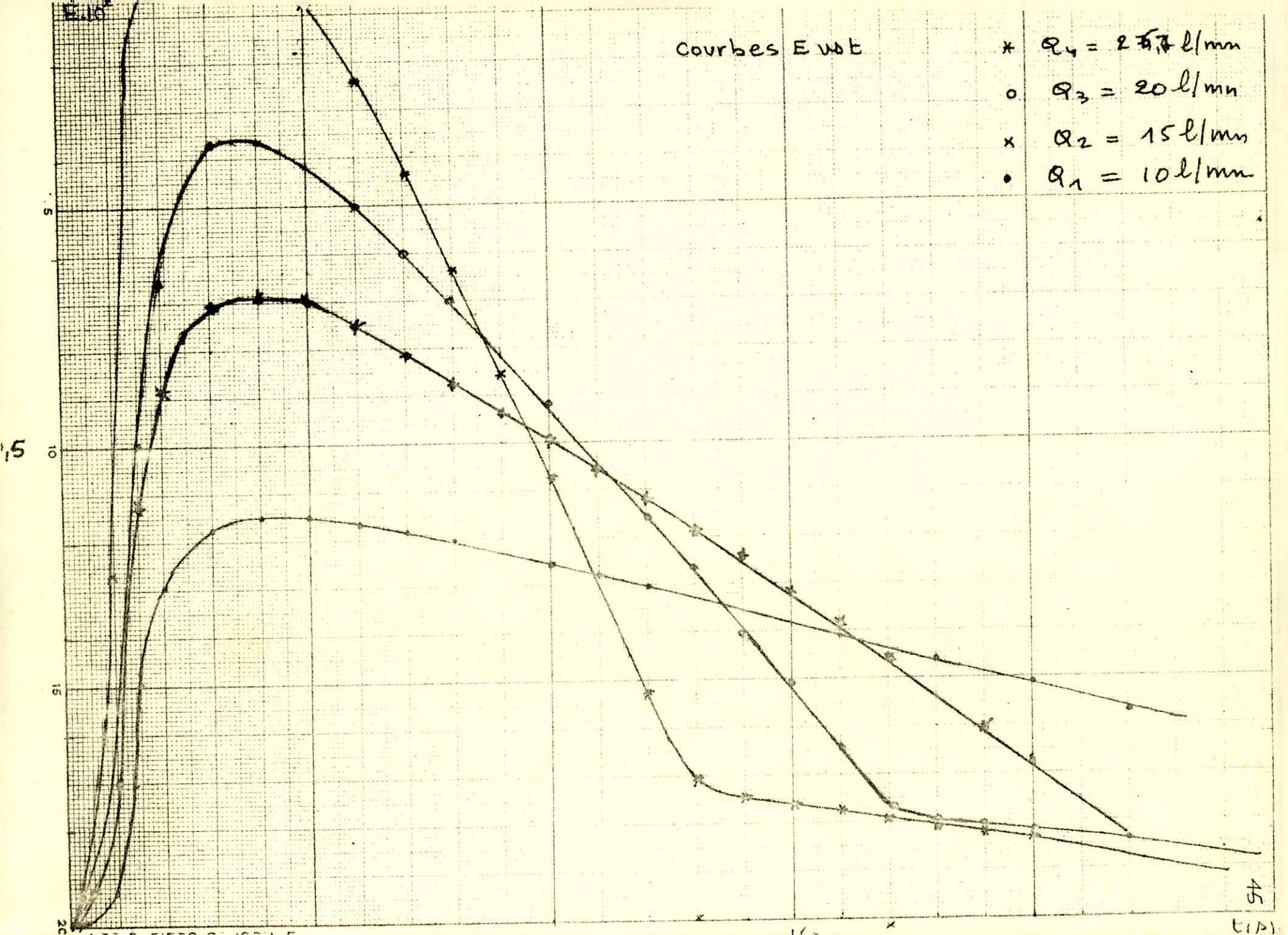
D'où la valeur de $J =$ nombre de réacteurs \times théoriques $= \frac{1}{\sigma_\theta^2}$ (Voir tableau 6)

- Tracé des courbes $E(t)$ et $E(\theta)$: On a tracé les courbes $E(t)$ sur un même graphe avec le débit comme paramètre. Les courbes $E(\theta)$ ont été reproduites séparément afin de bien déterminer leur sommet.

- Tracé des courbes Intensité $\lambda(t)$ (voir tableau n° 7) : étant donné qu'on n'a pas fait d'injection échelon, pour arriver à

Courbes E wt

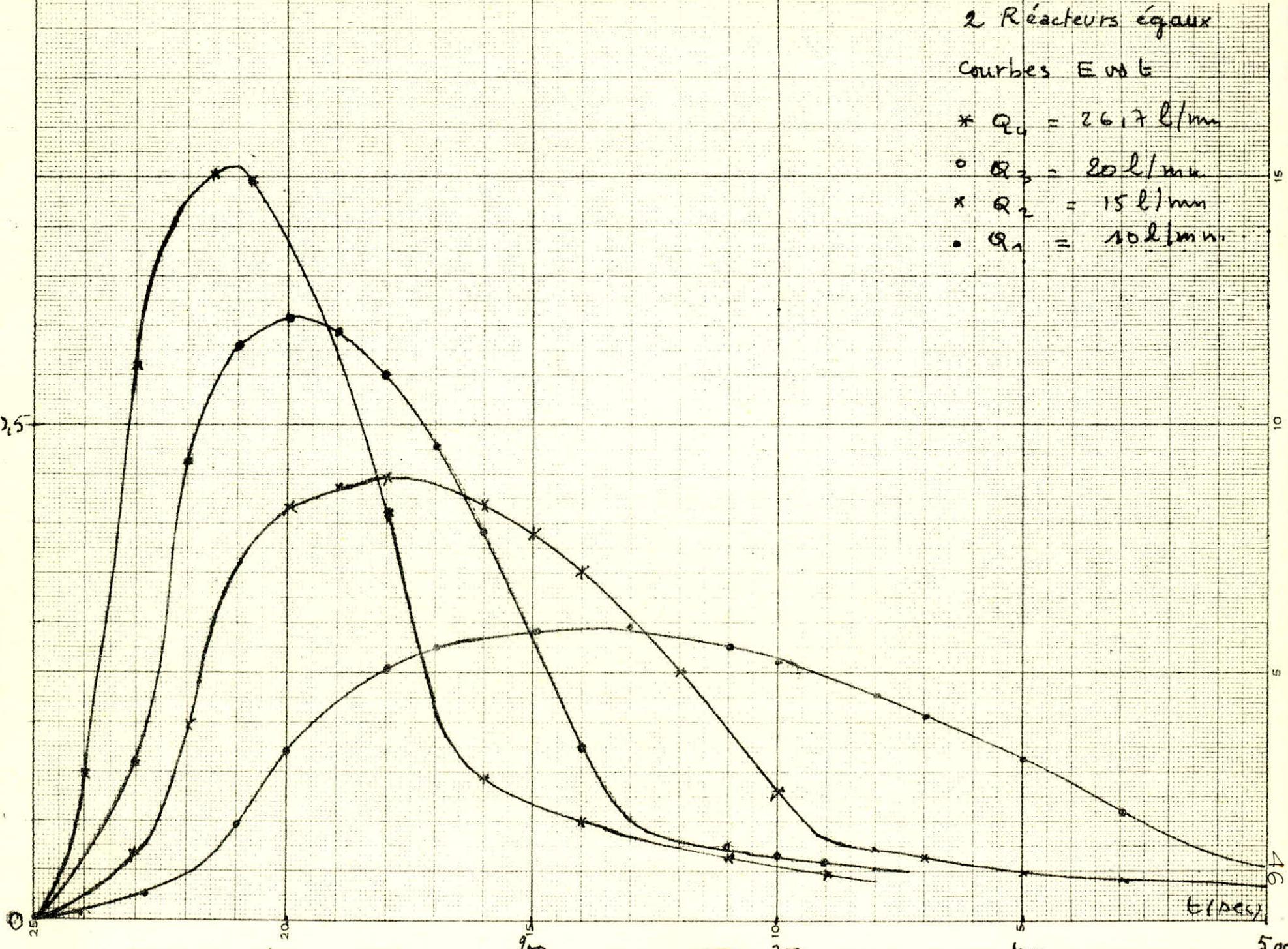
- * $Q_4 = 25 \frac{l}{mn}$
- o $Q_3 = 20 \frac{l}{mn}$
- x $Q_2 = 15 \frac{l}{mn}$
- $Q_1 = 10 \frac{l}{mn}$



2 Réacteurs égaux

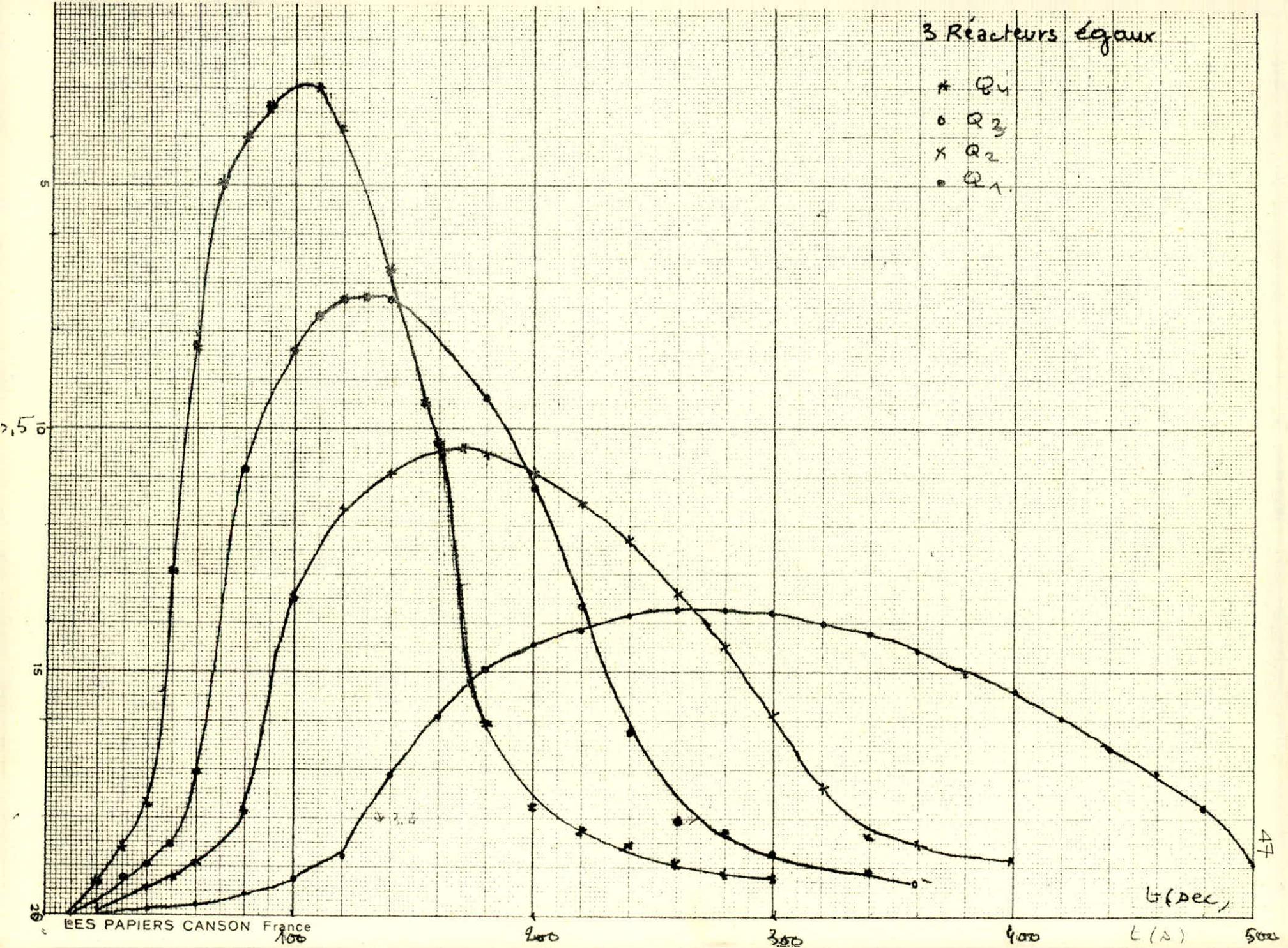
Courbes E vs t

- * $Q_0 = 26.7 \text{ l/min}$
- o $Q_3 = 20 \text{ l/min}$
- x $Q_2 = 15 \text{ l/min}$
- $Q_1 = 10 \text{ l/min}$



3 Réacteurs égaux

- * Q₄
- o Q₃
- x Q₂
- Q₁



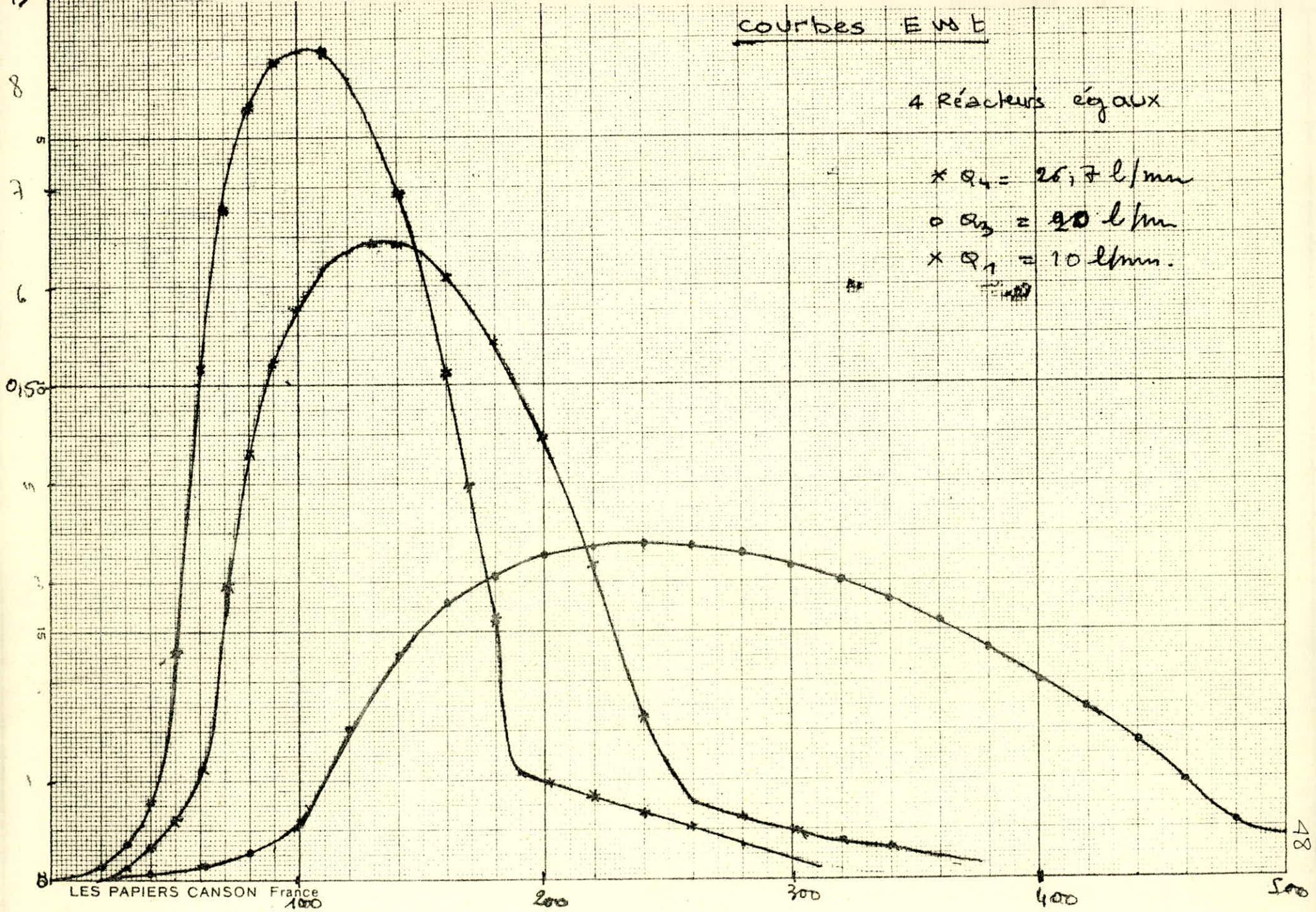
Courbes E vs t

4 Réacteurs égaux

* $Q_4 = 26,7 \text{ l/min}$

o $Q_3 = 20 \text{ l/min}$

x $Q_1 = 10 \text{ l/min}$



la courbe $\lambda(t)$, on a utilisé les relations qui existent entre les différentes courbes de distributions: soit

$$\lambda(t) = \frac{E(t)}{1 - F(t)} = \frac{E(t)}{1 - \int_0^t E(t) \cdot dt}$$

Calcul de F:

on a:

$$F(t) = \int_0^t E(t) \cdot dt = \int_0^t \frac{C(t)}{S} \cdot dt$$

soit:

$$F(t) \cdot S = \int_0^t C(t) \cdot dt$$

On a préféré utiliser encore la courbe C.

A l'aide du planimètre, on calcule la surface en chaque point de la courbe C: on trouve une valeur :

$$S' = \int C(t) \cdot dt \text{ en cm}^2$$

Or on connaît la surface de toute la courbe C en cm², on fait alors:

$$F(t) = \frac{S'(\text{cm}^2)}{S(\text{cm}^2)}$$

puis $(1 - F)$ et enfin on passe à $\lambda(t) = \frac{E(t)}{1 - F(t)}$

Réseau de courbes F(t):

On les a tracé à titre indicatif puisqu'on avait les valeurs pour chaque série de réacteurs

Réseau de courbes I:

On les a déduite directement à partir de la relation:

$$I(t) = \frac{1 - F(t)}{E}$$

On a tracé aussi, toujours à titre indicatif, un réseau pour trois réacteurs en série.

Calcul du temps de séjour théorique:

Il se calcul à partir des caractéristiques géométriques de l'appareil et du débit:

$$\tau = \frac{V}{Q}$$

- Le volume V n'est pas rigoureusement égal à 60 l pour deux raisons :

- + La présence de chicanes et de mastic diminue le volume géométrique de l'appareil.
- + La hauteur de l'eau varie de façon notable dans

le dernier bac: elle atteint en moyenne 5mm au-
tour de la graduation fixée. Ceci introduit une
erreur importante qui rend négligeable celle in-
troduite en ne tenant pas compte du volume oc-
cupé par les chicanes et le mastic.

- Calcul d'erreur sur V: On considérera que
l'erreur provient du dernier réacteur de
la série.

On a donc $V = B \times b \times h$.

$$\frac{\Delta V}{V} = \frac{\Delta h}{h} \quad (B \text{ et } b \text{ étant fixés par construction})$$

$$h = 0,5 \text{ cm}$$

On prendra $h = 25,4 \text{ cm}$ (pour avoir une bor-
ne supérieure de l'erreur) car dans le
cas d'un réacteur, on a $h = 31 \text{ cm}$.

$$\frac{\Delta V}{V} = \frac{0,5}{25,4} = 0,02$$

$$\text{D'où } V = 0,02 \times 60 = 1,20 \text{ l}$$

$$\text{d'où } \frac{\Delta \tau}{\tau} = \frac{\Delta V}{V} + \frac{\Delta Q}{Q}$$

On obtient donc une valeur différente
pour chaque débit.

Exemple de calcul :

$$Q = 26,7 \text{ l/min} \quad \Delta Q = 0,1 \quad \tau = 135 \text{ s}$$

$$\frac{\Delta \tau}{\tau} = \frac{0,1}{26,7} + 0,02 = 0,024 = 2,4\% \Rightarrow \Delta \tau = 3,24 \text{ s}$$

Evaluation des volumes morts :

$$\text{On a } \frac{V_m}{V} = 1 - \frac{\bar{t}}{\tau}$$

exemple : quatre réacteurs égaux
 $Q = 26,7 \text{ l/min}$

$$\frac{V_m}{V} = 1 - \frac{125,5}{135} = 0,07 \quad V_m = 0,07 \times 60 = 4,2 \text{ l}$$

Calcul de l'erreur sur V_m :

$$\frac{\Delta V_m}{V_m} = \frac{\Delta V}{V} + \frac{\Delta \tau}{\tau} + \frac{\Delta \tau}{\tau - \bar{t}} + \frac{\Delta \bar{t}}{\tau - \bar{t}}$$

Bien que \bar{t} ait été calculé à l'aide
d'une expression approchée, on considère
que $\Delta \bar{t}$ est négligeable devant $\Delta \tau$ et ΔV .

$$\text{Si } V_m = 4,2 \text{ l} \text{ on a } \Delta V_m = 1,6 \text{ l}$$

$$V_m = 4,2 + 1,6$$

II-5. Interprétation des résultats :

Calcul de \bar{t}

Le calcul montre une différence importante entre le temps de séjour et la valeur \bar{t} déduite à partir des courbes C et on a toujours $\bar{t} < \tau$

Ceci est, en principe, le signe de l'existence de volumes morts.

II-5.1. Evolution des volumes morts avec le nombre de réacteurs et le débit :

Les volumes morts diminuent en général quand le débit augmente car la turbulence améliore le mélange. Ils diminuent aussi avec le nombre de réacteurs en série et ceci est logique car il est beaucoup plus facile d'agiter quatre réacteurs en série qu'un réacteur de même volume global.

II-5.2. Cas particulier d'un réacteur unique ;

Les volumes morts trouvés dans ce cas sont non seulement dus à une mauvaise agitation mais aussi à l'existence d'un court-circuit sur le traceur. En effet la géométrie de l'écoulement et la méthode d'injection (en surface) favorise ce court-circuit.

II-5.3. Calcul de J :

Toutes les valeurs de J indiquent l'existence de zones stagnantes. On a toujours $J_{\text{théor}} > J_{\text{réel}}$

II-5.4. Confirmation de l'existence d'un court-circuit sur le traceur : expérience d'injection au fond :

Nous reprenons un seul réacteur pour lequel nous avons trouvé un volume mort trop important.

Avec le même débit nous refaisons une expérience où le traceur est cette fois-ci envoyé au fond du bac à l'aide de l'air comprimé.

	$J_{red} = 1$	$J_{red} = 2$	$J_{red} = 3$	$J_{red} = 4$
	$J_{exp.}$	$J_{exp.}$	$J_{exp.}$	$J_{exp.}$
$Q_1 = 10 \text{ l/mn}$	1,45	5	6,5	7
$Q_2 = 15 \text{ l/mn}$	1,75	3,7	5,76	/
$Q_3 = 20 \text{ l/mn}$	1,62	3,25	3,43	5,1
$Q_4 = 26,7 \text{ l/mn}$	1,72	2,45	3,97	5,5

valeurs de $J_{exp.}$ à partir de σ_0^2

Tableau 2

TABLEAU N° 1

	J = 1				J = 2			J = 3			J = 4		
	$\bar{\tau}$ (sec)	$\frac{\Delta \bar{\tau}}{\bar{\tau}}$	\bar{E} (sec)	$\Delta \bar{\tau}$ (sec)	$\bar{\tau}$ (sec)	$\Delta \bar{\tau}$ (sec)	\bar{E} (sec)	$\bar{\tau}$ (sec)	$\Delta \bar{\tau}$ (sec)	\bar{E} (sec)	$\bar{\tau}$ (sec)	$\Delta \bar{\tau}$ (sec)	\bar{E} (sec)
Q ₁	360	0,03	179,8	10,8	360	10,8	283,2	360	10,8	301,5	360	10,8	292
Q ₂	240	0,027	118,9	6,48	240	6,48	194,7	240	6,48	211,8	240	6,48	/
Q ₃	180	0,025	96,2	4,5	180	4,5	151,2	180	4,5	154,8	180	4,5	156,5
Q ₄	135	0,024	78,6	3,24	135	3,24	108,35	135	3,24	113,3	135	3,24	125,55

Calcul de \bar{E} à partir des courbes $c(t)$

	Injection en Surface			Injection au fond		
	Q_2	Q_3	Q_4	Q_2	Q_3	Q_4
τ (sec)	240	180	135	240	180	135
E (sec)	118,9	96,2	78,6	125,2	103,1	81,4
V_m (l)	30,3	27,9	25,1	28,7	25,6	23,7
ΔV_m	8,5	7,7	7,1	8,0	7,3	6,8
$J_{r_0}^2$	3,7	3,25	2,45	1,45	1,48	1,68
$J_{graph.}$	1,49 L < 1,72	1,49 L < 1,72	1,51 L < 1,6	1,51 L < 1,6	1,28 L < 1,56	1,28 L < 1,78

1 Réacteur Agité

Tableau Comparatif
des Volumes morts
et des Paramètres J
Pour l'injection en
Surface et au fond

TABLEAU N° 5.1

		Q ₁		Q ₂		Q ₃		Q ₄	
J=1	$\leq \theta_{max} \leq$	0,38	0,44	0,33	0,42	0,29	0,35	0,34	0,41
	$\leq J_{exp} \leq$	1,61	1,78	1,49	1,72	1,41	1,54	1,51	1,69
	J _{exp. moyen}	1,69		1,60		1,47		1,6	
J=2	$\leq \theta_{max} \leq$	0,67	0,73	0,71	0,78	0,66	0,679	0,72	0,76
	$\leq J_{exp.} \leq$	3,03	3,7	2,45	3,54	2,94	3,12	3,57	4,16
	J _{exp. moyen}	3,36		2,99		3,02		3,86	
J=3	$\leq \theta_{max} \leq$	0,75	0,79	0,74	0,77	0,81	0,84	0,86	0,88
	$\leq J_{exp.} \leq$	4,0	4,76	3,84	4,34	5,26	6,25	7,14	8,33
	J _{exp. moyen}	4,4		4,1		5,7		7,7	
J=4	$\leq \theta_{max} \leq$	0,83	0,85	/	/	0,83	0,88	0,86	0,9
	$\leq J_{exp.} \leq$	5,8	6,6	/	/	5,9	8,3	7,14	10
	J _{exp. moyen}	6,2		/		7,1		8,6	

TABLEAU N° 3

Calcul de J_{exp.} à l'aide des courbes E₀ vs θ

56

TABLEAU N° 5

Evaluation des volumes morts

	J = 1					J = 2					J = 3					J = 4				
	τ (Sec)	\bar{E} (Sec)	$1 - \frac{\bar{E}}{\tau}$	V_m (l)	ΔV_m (l)	τ (Sec)	\bar{E} (Sec)	$1 - \frac{\bar{E}}{\tau}$	V_m (l)	ΔV_m (l)	τ (Sec)	\bar{E} (Sec)	$1 - \frac{\bar{E}}{\tau}$	V_m (l)	ΔV_m (l)	τ (Sec)	\bar{E} (Sec)	$1 - \frac{\bar{E}}{\tau}$	V_m (l)	ΔV_m (l)
Q ₁	360	179,8	0,5	30	5,2	360	283,2	0,213	12,8	2,4	360	301,5	0,163	9,78	1,37	360	292	0,19	11,4	2,4
Q ₂	240	118,9	0,49	30,3	8,5	240	194,7	0,188	11,3	2,1	240	211,8	0,12	7,2	1,6	240	210,2	/	/	/
Q ₃	180	96,2	0,534	27,96	7,70	180	151,2	0,16	9,6	1,1	180	154,8	0,14	8,4	1,1	180	156,5	0,13	7,8	1,8
Q ₄	135	78,6	0,582	25,1	7,1	135	108,35	0,187	11,2	0,8	135	113,3	0,16	9,6	1,0	135	125,55	0,07	4,2	1,6

TABEAU N° 4

Calcul de la Conversion Expérimentale à partir des Courbes
pour $k = 1,16 \cdot 10^{-2} \text{ sec}^{-1}$ à $25,05^\circ\text{C}$

	J=1	J=2	J=3	J=4
	$\bar{X} (\%)$	$\bar{X} (\%)$	$\bar{X} (\%)$	$\bar{X} (\%)$
Q ₁	73,49	90,2	93,25	94,3
Q ₂	63,2	83	86	/
Q ₃	58,55	77	80	85,72
Q ₄	51,4	72,2	75,8	76,5

Résultats :

- 1°) Les courbes C obtenues présentent des queues moins longues que lors de l'injection en surface.
- 2°) Les calculs montrent que les volumes morts sont sensiblement diminués.

C'est la confirmation que nous attendions de cette expérience. Mais, malgré cela, les volumes morts restent encore très importants, nous verrons plus loin pourquoi.

II-5.5. Forme des courbes $\lambda(t)$:

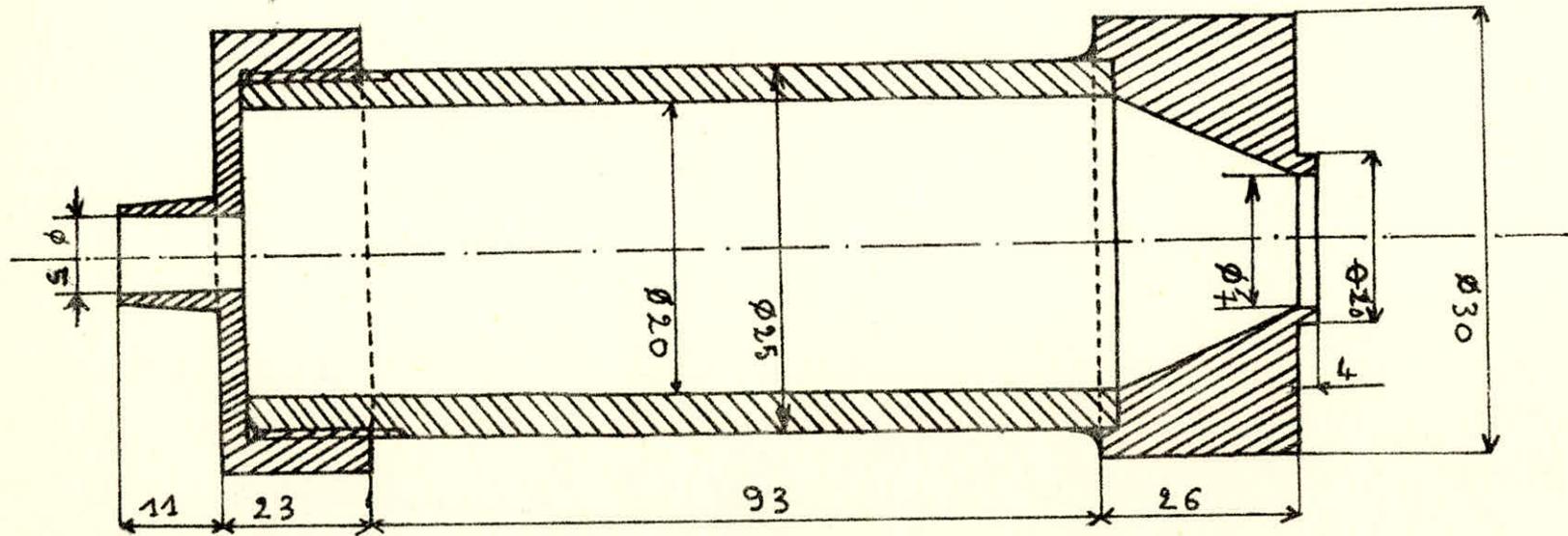
Les courbes $\lambda(t)$ ne sont pas monotones croissantes ce qui montre que l'on n'a pas un bon macromélange, en outre, le graphe de ces courbes indique l'existence de volumes morts.

Evolution de ces courbes avec le débit:

En premier lieu, la forme des courbes varie sensiblement avec le nombre de réacteurs: en effet, elles changent fréquemment de pente (dans le cas de 2 et 4 réacteurs) et présentent des débuts de paliers, ceci est très net dans le cas de 2 réacteurs. Ceci est sans doute dû à l'existence de zones mieux agitées que d'autres.

Ces courbes ont l'allure la plus régulière dans le cas de trois réacteurs où il n'existe pas de court-circuit et où l'écoulement de fluide est le plus "favorable" à l'étude de la DTS. On remarque aussi que la concavité des courbes est d'autant plus grande que les volumes morts sont plus importants. Ceci est dû au fait que le temps que mettent les molécules pour quitter les zones stagnantes est d'autant plus élevé que le débit est plus faible,

Cylindre à bout cône (en plexiglas)
pour injection du traceur au fond du
bac.



$E \cdot 10^3$

LE RÉACTEUR AGITÉ

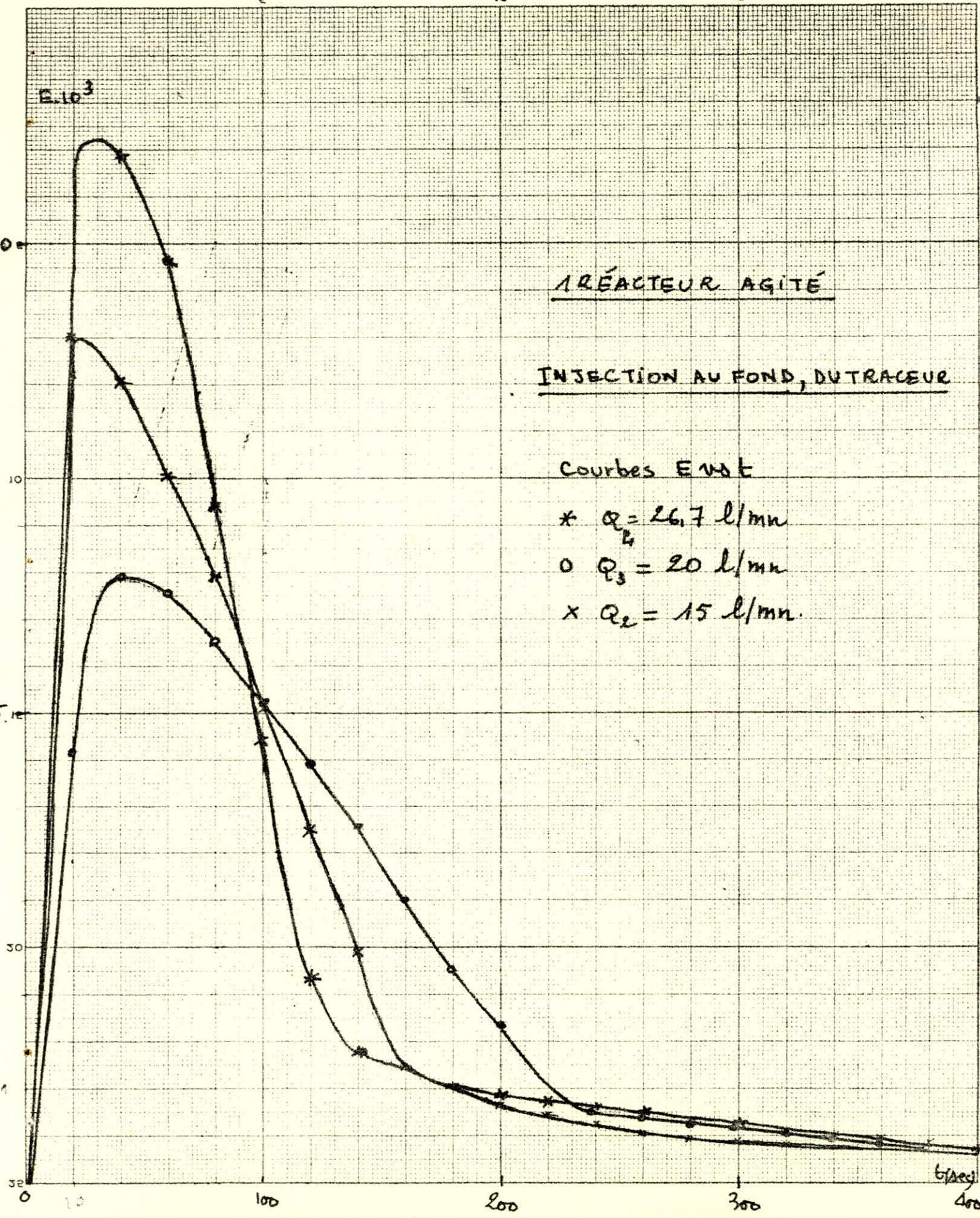
INJECTION AU FOND, DU TRACEUR

Courbes E vs t

* $Q_2 = 26.7 \text{ l/mn}$

o $Q_3 = 20 \text{ l/mn}$

x $Q_4 = 15 \text{ l/mn}$



II-5.6. Valeurs de la conversion:

61

La conversion expérimentale moyenne croît avec le nombre de réacteurs ceci est logique puisque précisément le but d'une association en série de réacteurs est d'augmenter cette conversion.

Elle diminue quand le débit augmente car le temps de séjour ^{diminue} donc le temps de réaction diminue.

II-6. Discussion de ces résultats:

Quand on compare les résultats obtenus dans cette première partie (voir tableau 2', 1, 4) avec ^{ceux} obtenus l'année précédente, on constate que:

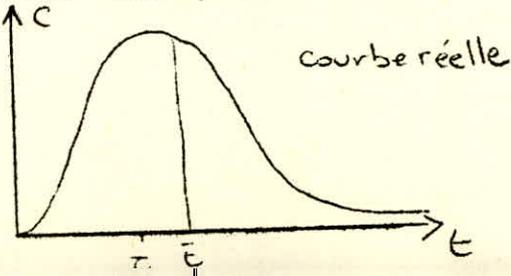
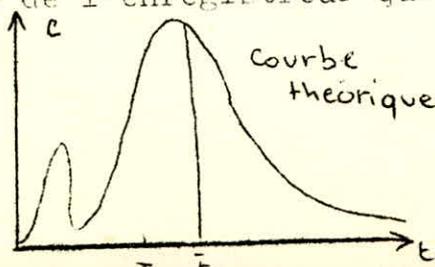
1°) On a macromélangé moins "bon", or la circulation du liquide et la forme des agitateurs ont été choisies justement dans le but d'avoir un meilleur mélangeage. Pourquoi alors ces résultats?

2°) L'injection de traceur au fond n'a pas donné entièrement satisfaction. Pourquoi?

- la réponse à la première question est simple: le mélangeage a été moins "bon" tout simplement parce que la vitesse de rotation des agitateurs a été nettement ~~insuffisante~~ insuffisante. On a tourné à 500 tr/mn, alors que précédemment les agitateurs tournaient à 750 tr/mn, soit 250 tr/mn de plus. Pourquoi a-t-on choisi cette vitesse? Etant donné la forme des agitateurs (hélice marine), on a craint qu'une vitesse aussi élevée (750 tr/mn) ~~à l'importance~~ n'engendre d'importants vortex qu'il aurait été difficile d'éliminer; donc notre choix s'est fait de façon purement empirique.

- en ce qui concerne l'injection au fond avec de l'air comprimé, son efficacité est discutable car le plus souvent l'écoulement du fluide est perturbé, ce qui rend parfois délicat l'enregistrement de la courbe C: elle permet quand même de diminuer les volumes morts en supprimant le court-circuit sur le traceur.

3°) Aucune courbe $\lambda(t)$ ne permet de déceler l'existence de court-circuit. Ceci est sans doute dû à l'inertie de la plume de l'enregistreur qui "rate" une partie de la courbe C.



4°) La qualité du mélange est aussi notablement influencée par la position des hélices. Or nous n'avons pas disposé de manière scientifique les agitateurs (on a été limité par la longueur des tiges) alors que la hauteur h (cf. Paragraphe sur les agitateurs) est très importante puisqu'elle conditionne la circulation du fluide.

2.6. Conclusions sur cette première partie :

- 1°) Des trois facteurs principaux (vitesse et forme des agitateurs, écoulement du fluide) qui régissent l'agitation d'un liquide donné, il ressort nettement que le plus important est la vitesse de rotation des agitateurs: une vitesse faible donnerait un mauvais mélange, une vitesse trop forte créerait des vortex qui nuiraient aussi à la qualité du mélange.
- 2°) Les résultats montrent aussi qu'il est très difficile d'agiter parfaitement un grand volume de liquide.
- 3°) Les volumes morts ne sont pas seulement dus à une vitesse de rotation trop faible, mais aussi à la forme géométrique du réacteur? En effet, il est très difficile d'atteindre les portions de fluide séjournant dans les angles de l'appareil et de ce fait, il existera toujours des zones stagnantes dans les recoins. C'est d'ailleurs pour cette raison que dans l'industrie, on ne trouve pratiquement jamais de réacteurs agités ayant la forme parallélépipédique, mais des appareils ne comportant pas d'angles vifs.

OPTIMISATION

ETUDE DU PROBLEME

On a deux réacteurs agités, continus en série de volume $V_1 = 15\text{l}$ et $V_2 = 45\text{l}$. La courbe de DTS théorique (réponse à une injection impulsion) est :

$$E(t) = 1 / (T_1 - T_2) (\exp(-t/T_1) - \exp(-t/T_2))$$

$T_1 = V_1 / Q_0$, $T_2 = V_2 / Q_0$ Q_0 , débit à l'entrée du réacteur.

On essaiera, de déterminer T_1 et T_2 à partir de la courbe expérimentale par une méthode d'optimisation, celle-ci consiste à trouver T_1 et T_2 de façon à rendre minimale, la fonction d'erreur suivante :

$$S(T_1, T_2) = \sum_{i=1}^n (E_{\text{exp}}(t_i) - E_{\text{théo}})^2$$

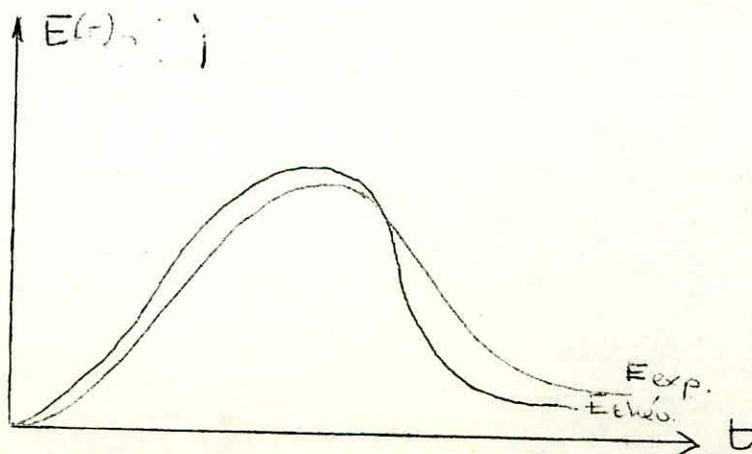
c'est-à-dire :

$$S(T_1, T_2) = \sum_{i=1}^n (E_{\text{exp}}(t_i) - 1 / (T_1 - T_2) (\exp(-t_i/T_1) - \exp(-t_i/T_2)))^2$$

$$E_{\text{théo}}(t_i) = 1 / (T_1 - T_2) (\exp(-t_i/T_1) - \exp(-t_i/T_2))$$

$$\text{Min } S(T_1, T_2) = \sum_{i=1}^n (E_{\text{exp}}(t_i) - 1 / (T_1 - T_2) (\exp(-t_i/T_1) - \exp(-t_i/T_2)))^2$$

La minimisation se faisant par une technique de recherche directe, la méthode d'optimisation utilisée est celle de POWELL.



6×10^3

4×10^3

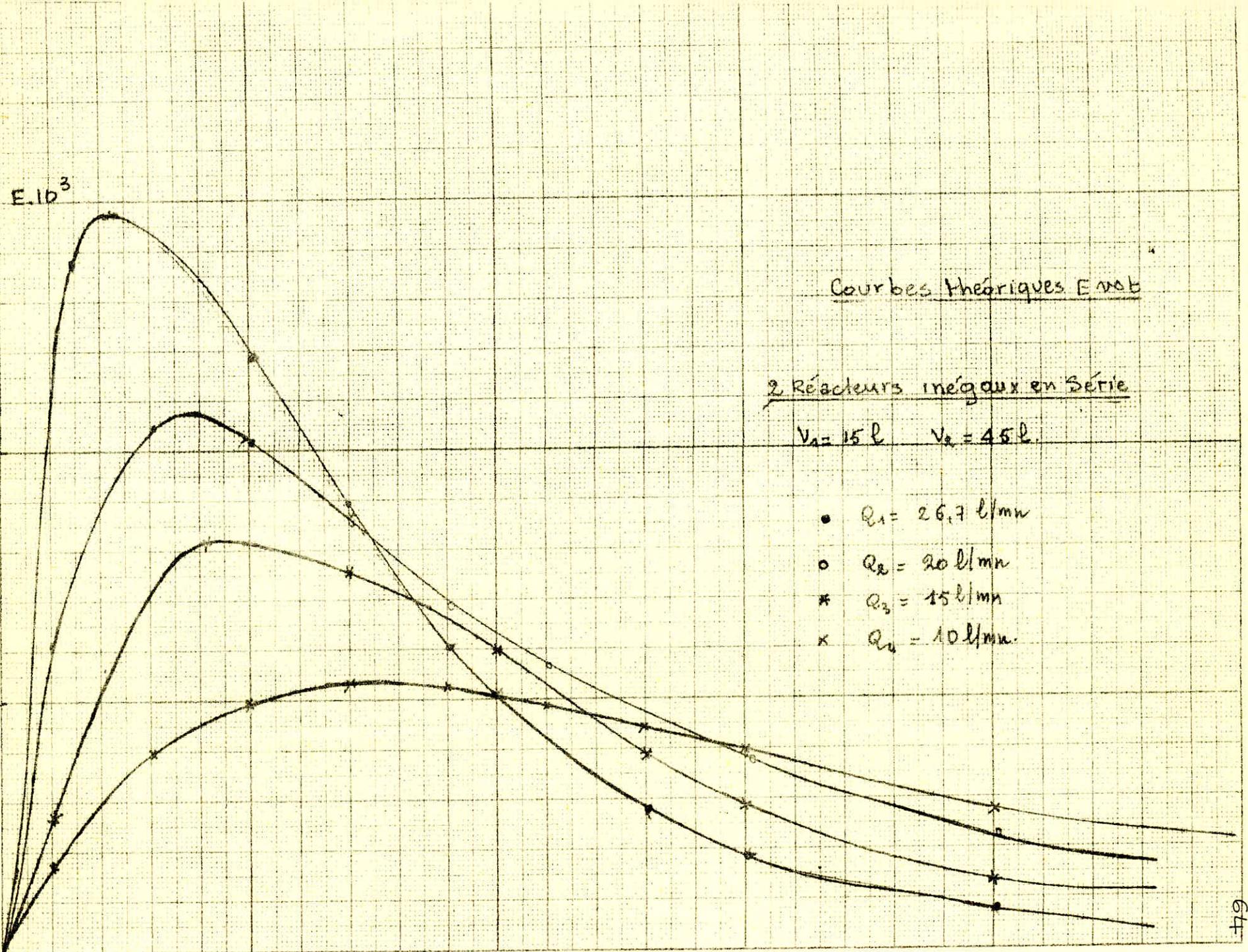
2×10^3

Courbes théoriques E_{tot}

2 Réacteurs inégaux en Série

$V_1 = 15 \text{ l}$ $V_2 = 45 \text{ l}$

- $Q_1 = 26.7 \text{ l/mn}$
- $Q_2 = 20 \text{ l/mn}$
- * $Q_3 = 15 \text{ l/mn}$
- x $Q_4 = 10 \text{ l/mn}$



METHODE DE POWELL

Cette méthode repose sur un changement d'une direction de recherche après chaque itération, une itération correspond à des recherches à une dimension le long de chacune des directions précédentes.

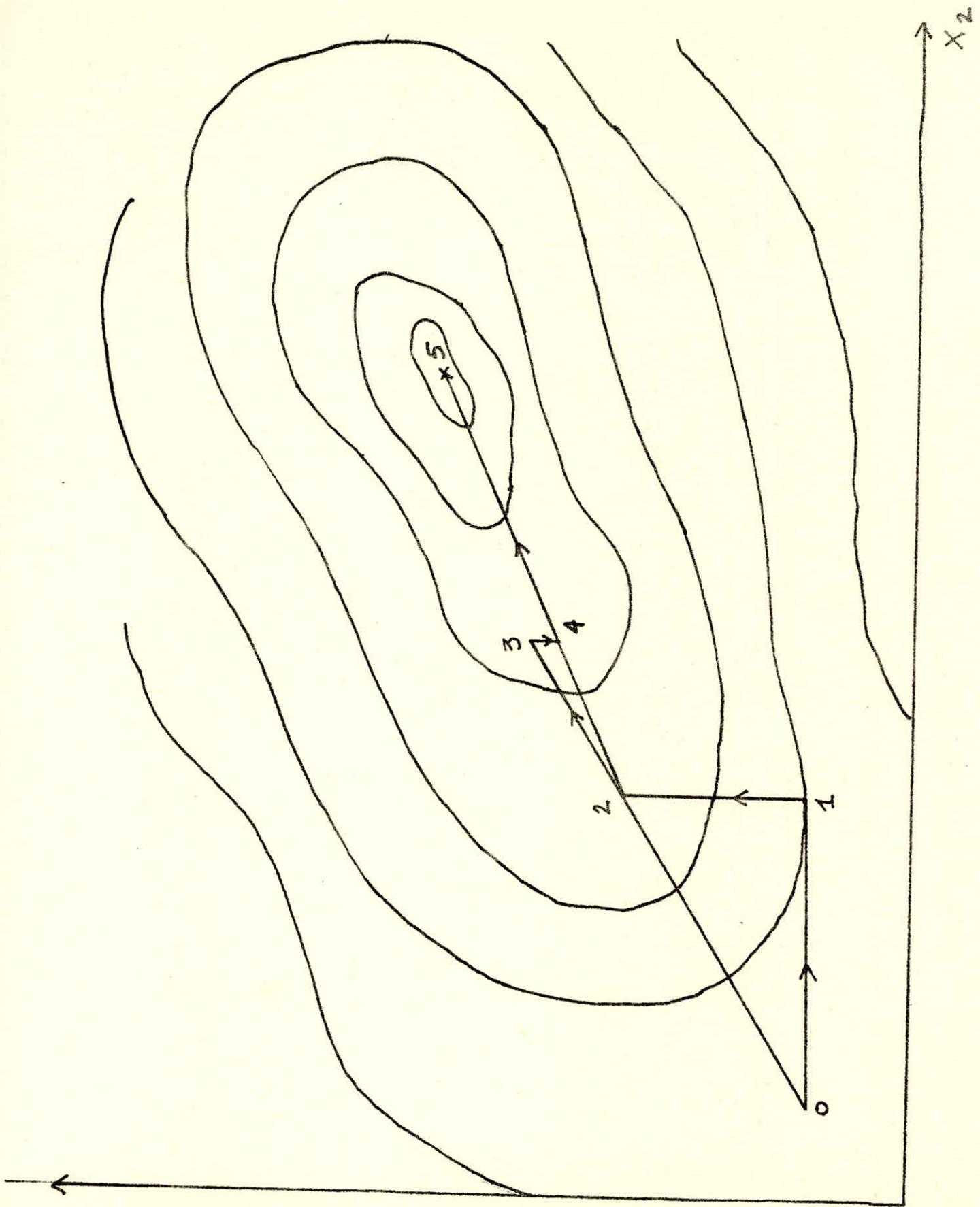
La nouvelle direction de recherche; est celle qui joint les deux points correspondants à la plus grande et à la plus petite valeur de la fonction objectif.

D'après l'Auteur cette méthode est très efficace si la fonction objectif: $F(X_1, X_2, \dots, X_n)$ est une forme quadratique: $F(X) = \frac{1}{2} X^t G X + B^t X + C$

EXEMPLE GRAPHIQUE DE LA METHODE DE POWELL

- 0 point de départ
- 0 }
1 } ^{etc} 1^e itération: points optimaux obtenus successivement
2 }
- 0-2 nouvelle direction
- 2 }
3 } ^{etc} 2^e itération: points optimaux obtenus successivement
4 }
- 2-4 nouvelle direction

Dans ce cas particulier, cette direction nous mène directement vers l'optimum(5).



X_1

EXEMPLE DE CHEMINEMENT
METHODE DE POWELL

X_2

Réduction de l'intervalle de recherche (REA) :

Si on ne possède aucune information sur l'intervalle de recherche, on prendra en entier, celui que peut nous fournir la machine. Mais, en général, l'utilisateur a toujours une idée sur cet intervalle de recherche, et il pourra de ce fait avoir une borne supérieure et une borne inférieure pour chaque variable x_i .

Recherche aléatoire (RA) :

Si la fonction à optimiser n'est pas unimodale sur l'intervalle de recherche, c'est-à-dire qu'elle ne possède pas d'extrémum sur celui-ci, on essaiera de la rendre unimodale par la recherche aléatoire. La méthode consiste à diviser l'intervalle H en petits intervalles égaux de façon à trouver au moins un où la fonction est unimodale, ensuite prendre parmi ces intervalles celui qui nous procure la plus grande probabilité à cerner la valeur optimale.

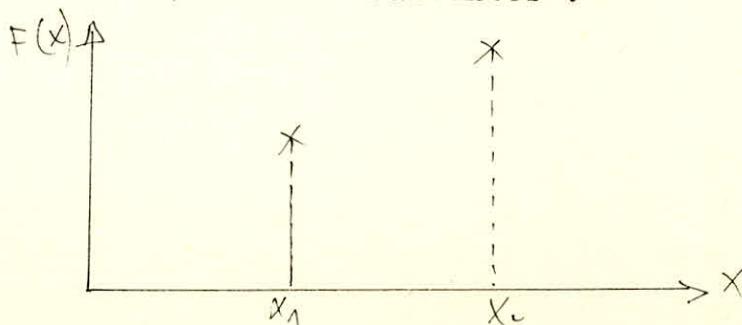
Méthode du nombre d'or (NBOR)

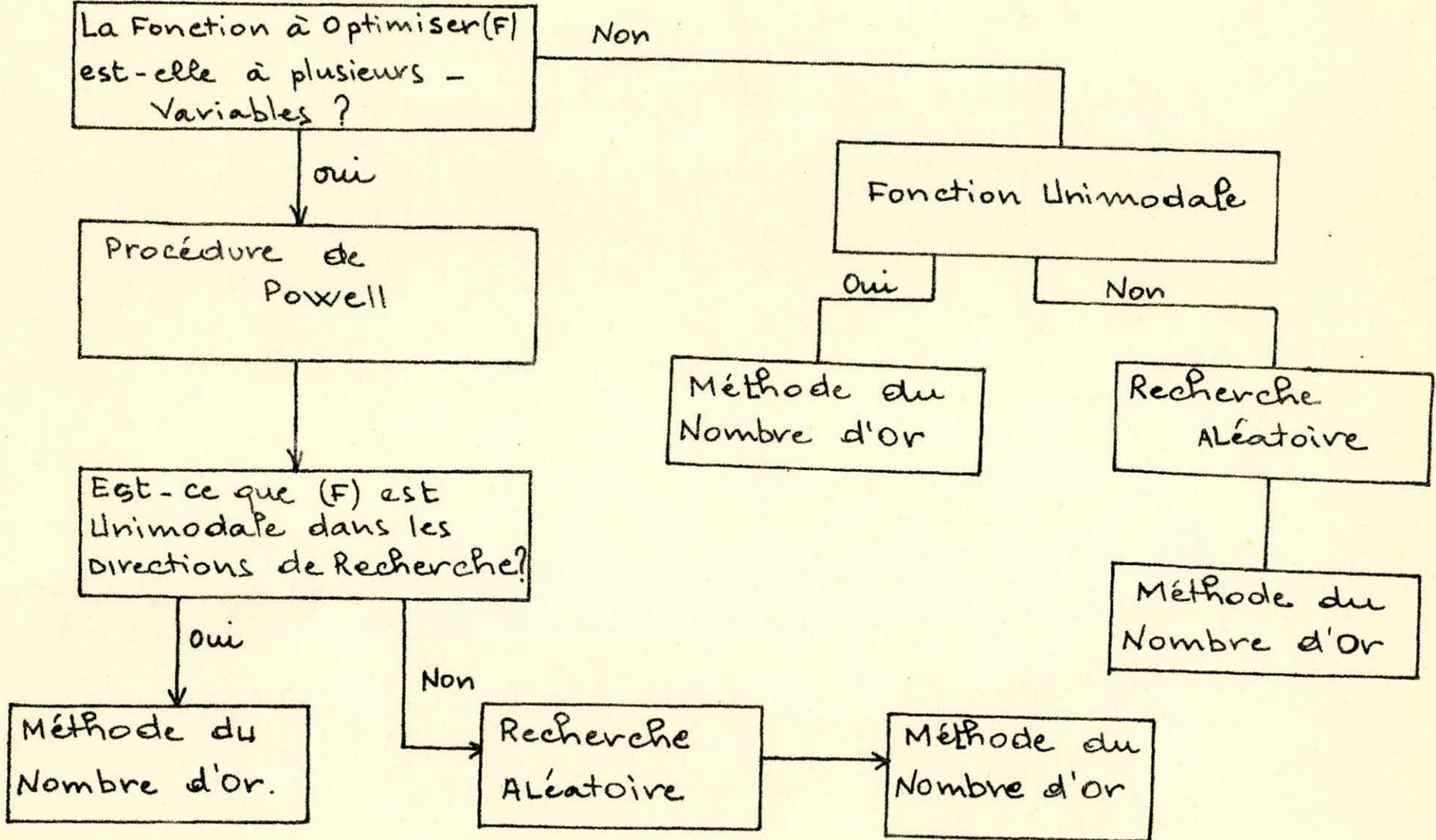
Dans la procédure de Powell, on est à chaque fois amené à trouver un x qui maximise $f(x)$, comme f est une fonction d'une seule variable x , on recherchera le x maximum par une technique de recherche directe, qui est la méthode du nombre d'or; cette méthode résoud le problème suivant: Etant donné $f(x)$ pour $0 \leq x \leq 1$, trouver a avec le minimum d'essais, le maximum de f à $z\%$ près, le nombre d'essais n'étant pas limité.

On placera la première expérience à $x_1 = 1/1+t$

On placera la 2ème expérience à $x_2 = t/1+t$

Ce qui permet de réduire l'intervalle après deux expériences au pire à $1/t$ et l'expérience qui est dans cet intervalle joue le rôle soit de x_1 soit de x_2 pour les deux expériences suivantes :

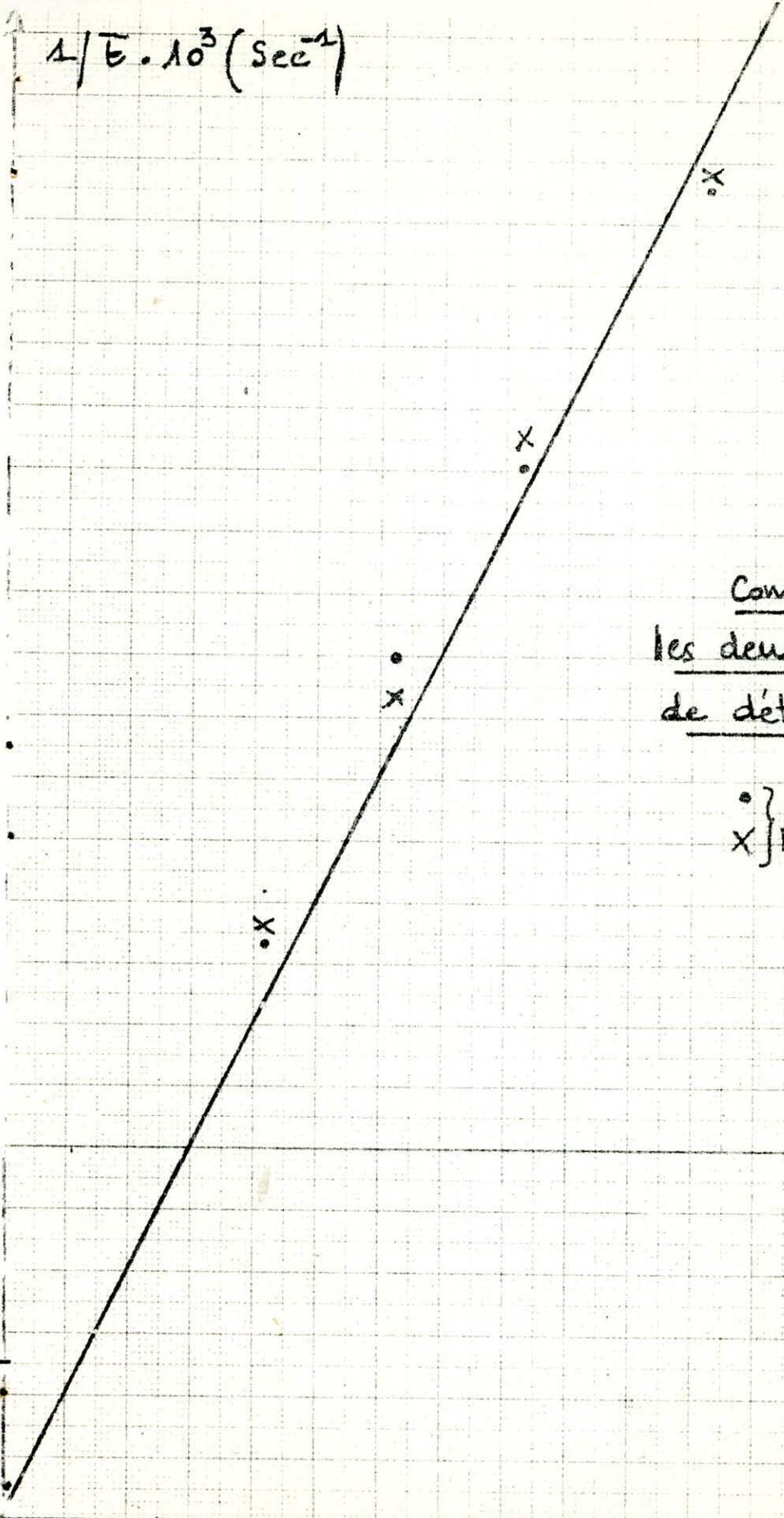




ORGANIGRAMME GENERAL

TABLEAU DES RESULTATS : 2 Réacteurs inégaux de Volume $V_1=15\text{ l}$, $V_2=45\text{ l}$

	$Q_1 = 10 \text{ l/min}$	$Q_2 = 15 \text{ l/min}$	$Q_3 = 20 \text{ l/min}$	$Q_4 = 26,7 \text{ l/min}$
τ_1 (Sec)	90	60	45	33,71
τ_2 (Sec)	270	180	135	101,12
\bar{E}_1 (Sec)	64,956	44,23	36,875	28,23
\bar{E}_2 (Sec)	203,81	135,31	110,625	90,38
V_{m1} (l)	4,17	3,94	2,71	2,43
V_{m2} (l)	11,032	11,17	8,041	4,72



Comparaison entre
les deux Méthodes
de détermination de \bar{E}

• } optimisation directe
 x } Méthode des Moments

1

1

$Q(l/sec) \times 10$

$1/E \cdot 10^3 (Sec^{-1})$

INTERPRETATION DES RESULTATS :

D'après notre tableau de valeurs, on voit que les volumes morts diminuent quand le débit augmente, à faibles débits les volumes morts sont de l'ordre de 30% et diminuent jusqu'à 12% , à fort débits.

CONCLUSION :

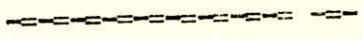
Cette méthode d'optimisation est très avantageuse par rapport à la méthode des moments du fait qu'elle nous permet de connaître les volumes morts dans chaque réacteur.

Avantages de la méthode de POWELL

Face sans qu'elle ne nécessite pas l'emploi de dérivés, elle est avantageuse par rapport à la méthode de Rosenbrock, en ce sens qu'elle ne nécessite pas l'emploi d'un pas fixé à l'avance, et surtout qu'elle a un temps de calcul beaucoup moins lent.

inconvénient de la méthode de POWELL

Pour optimiser une fonction F, on a besoin de technique d'optimisation: dans notre cas, c'est le nombre d'or, et la recherche aléatoire.



MISE EN ŒUVRE D'UNE RÉACTION
DU PREMIER ORDRE DANS LE RÉACTEUR

EXPERIMENTAL

1. Introduction :

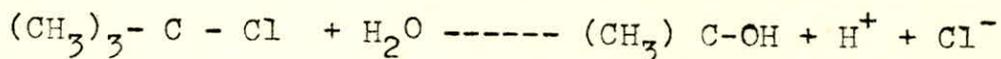
On sait que lorsque la vitesse d'une réaction chimique est du premier ordre, l'avancement de la réaction ne dépendra que du temps de réaction. Il en résulte que l'on peut déterminer ce paramètre si l'on connaît la DTSE du fluide dans le réacteur.

2. Choix de la réaction chimique :

Le choix est assez limité car la réaction doit satisfaire aux critères suivants :

- Elle doit être athermique.
- Elle doit avoir un avancement suffisant au bout d'un temps assez court.
- Si possible, elle doit être non catalytique.

De nombreux auteurs ont considéré la réaction d'hydrolyse isotherme du chlorure de butyle tertiaire qui est une réaction de substitution nucléophile :



Cinétique de la réaction : Le processus réactionnel se fait en deux étapes :

1°) Mise en émulsion du chlorure très peu soluble dans l'eau.

2°) Hydrolyse du chlorure.

Pour avoir une réaction d'ordre global égal à 1, il est nécessaire de réduire au maximum la première étape.

Pour augmenter la solubilité du chlorure, on utilise pour l'hydrolyse une solution eau-alcool à 13% en poids en alcool. De même, le chlorure de butyle tertiaire est mélangé avec de l'éthanol absolu.

3. Détermination de la conversion expérimentale-Principe de la mesure :

L'hydrolyse de $(\text{CH}_3)_3\text{C-Cl}$ conduit à de l'acide chlorhydrique totalement dissocié en H^+ et Cl^- . Les ions H^+ ainsi libérés sont décelés à la sortie du réacteur par conductimétrie.

Pour cela, on étalonne au préalable l'appareil en préparant des solutions d'acide de titre connu. On peut ainsi connaître la concentration en ions H^+ à la sortie. Cette valeur est aussi égale à la concentration du chlorure ayant réagi dans le réacteur.

Connaissant la concentration du chlorure à l'entrée, on déduit facilement la conversion à la sortie. En effet,

$$\bar{x}_{\text{exp}} = \frac{[(\text{CH}_3)_3\text{CCl}] \text{ à la sortie}}{[(\text{CH}_3)_3\text{CCl}] \text{ à l'entrée}}$$

4. Le montage expérimental

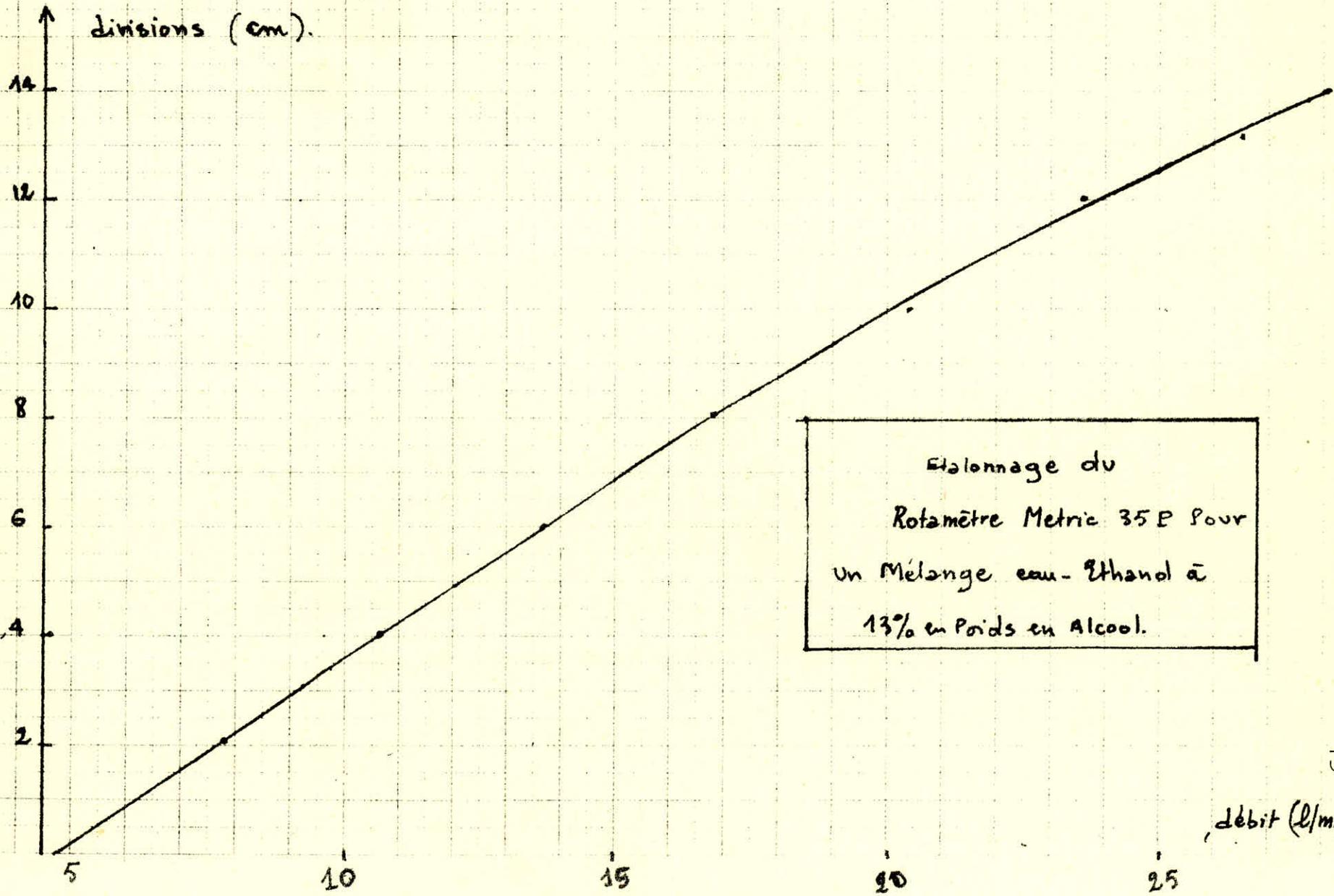
C'est le même que précédemment avec quelques modifications :

- On a installé un rotamètre Méttric 10 P pour déterminer le débit du fluide réactionnel.
- Le mélange eau-éthanol est stocké dans un grand bac en ciment; une pompe permet d'amener ce liquide vers l'entrée du réacteur.
- Le bac contenant le réactif est installé à 10 m au dessus du réacteur.
- Ce réactif se déverse directement dans le premier bac.

N.B. / On n'a pas utilisé la cellule d'entrée pour l'alimentation en chlorure car la pression du mélange eau-éthanol étant beaucoup plus grande, elle risque de renvoyer le réactif dans le petit rotamètre.

5. Manipulation :

5.1. Préparation des réactifs :



- Avec de l'alcool industriel à 95°, on fait un mélange eau-éthanol à 13 % en poids d'alcool que l'on stocke dans un grand bac.
- Ensuite on fait une solution 0,5 M de chlorure de butyle tertiaire. Le solvant devant être théoriquement de l'éthanol absolu, mais comme on ne dispose pas de ce produit en quantité suffisante, on utilise l'alcool éthylique industriel distillé.

5.2. Mode opératoire

- On commence par fixer le débit du mélange eau-alcool et on règle sa hauteur dans le dernier bac.
- ensuite on fixe le débit en réactif en récupérant celui ci dans un ballon sec.
- au temps $t = 0$, on commence la réaction en déclanchant en même temps le chronomètre et le conductimètre.
- on arrête la réaction quand on atteint un pallier.

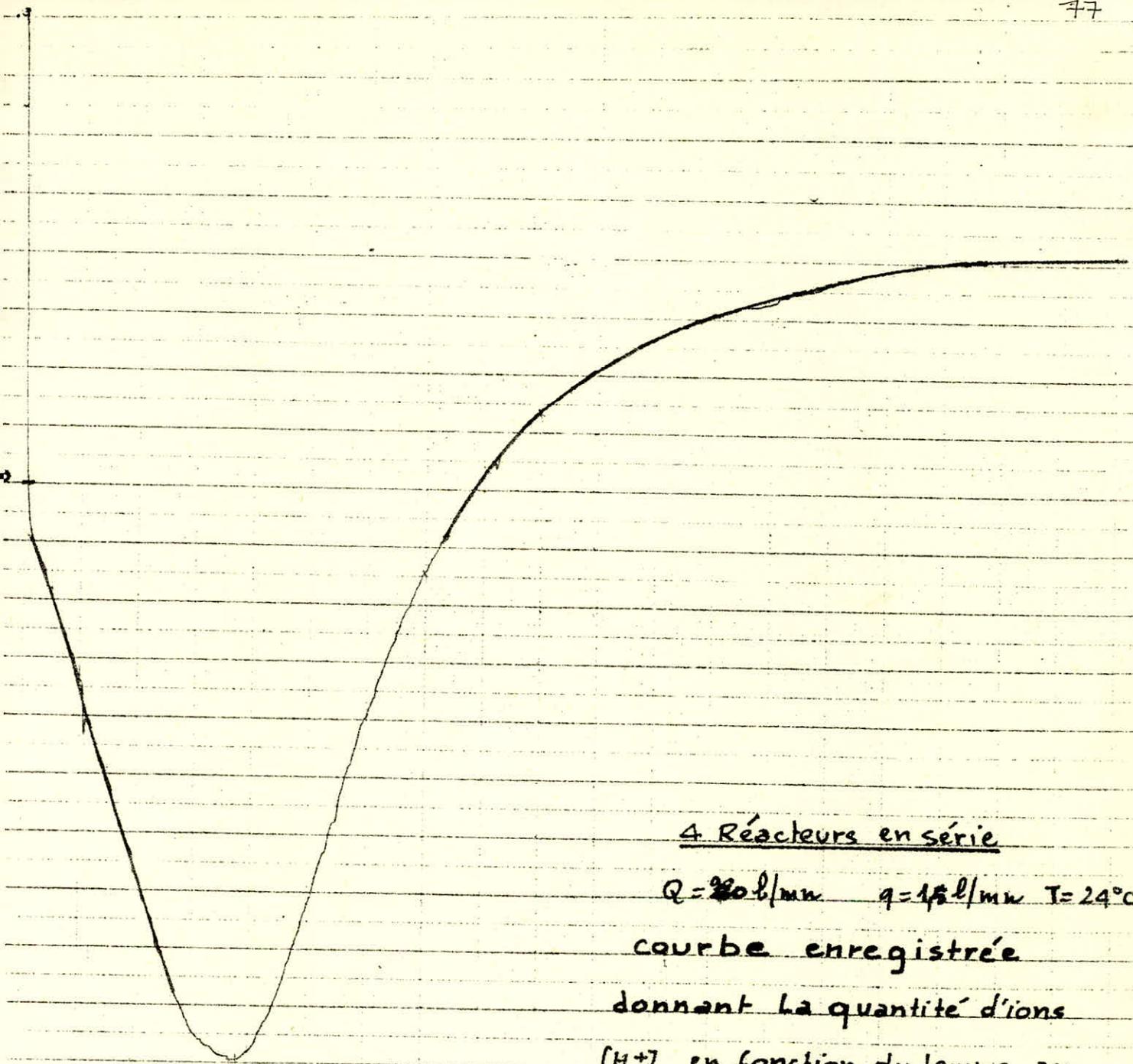
6. Résultats expérimentaux

6.1. Forme des courbes obtenues

Etant donné la manière dont on alimente le réacteur en réactif (on peut dire qu'on réalise une injection du type échelon), les courbes obtenues doivent avoir l'allure des courbes F. Or, elles commencent par décroître, passent par un minimum puis recommencent à croître de nouveau en présentant la même allure que la courbe F.

La présence de ce minimum s'explique ainsi:

- Au temps $t = 0$, quand on commence la réaction, le volume du réacteur augmente, et ceci durant tout le temps correspondant aux régimes transitoires. Donc, pendant cette période, la concentration en ions H^+ diminue, d'où la partie décroissante de la courbe. Au moment où la réaction d'hydrolyse libère de nouveaux ions H^+ , la concentration augmentera de nouveau, la courbe croîtra alors jusqu'à atteindre un palier correspondant à la conversion maximale.



4. Réacteurs en série

$Q = 20 \text{ l/mn}$ $q = 1 \text{ l/mn}$ $T = 24^\circ\text{C}$

courbe enregistrée
 donnant la quantité d'ions
 $[H^+]$ en fonction du temps au
 cours de la Réaction d'hydrolyse

6.2. Calculs :

On commence par étalonner le conductimètre en utilisant des solutions d'acide de titres connues.

On obtient une courbe donnant la concentration en (H^+) (comptée en nombre de carreaux) en fonction du pH.

1°) On repère le palier de la courbe expérimentale, on compte le nombre de carreaux depuis le repère zéro et on déduit le pH donc la concentration de la solution; on multiplie par alors le volume du réacteur pour avoir la quantité absolue de (H^+) donc de (Cl^-).

2°) La quantité totale de chlorure introduite est

$$(Cl^-)_{\text{entrée}} = 0,5 \times q \times t$$

On déduit alors la conversion .

q : débit du fluide réactionnel.

0,5 : Molarité de la solution de chlorure de butyle tertiaire.

t : temps de réaction.

Exemple:

4 réacteurs en série, $Q=20l/mn$, $q=1,5l/mn$,
 $t=5,83mn$.

$$(Cl^-)_{\text{entrée}} = 1,5 \times 0,5 \times 5,83 = 4,37 \text{ moles.}$$

$(Cl^-)_{\text{sortie}}$ = pour le palier, on a 14,6 carreaux
 d'où $pH=1,23$ ===== $(H^+) = 0,0587$

$$(H^+)_{\text{total}} = 0,0587 \times 60 = 3,52$$

$$\bar{X} = \frac{3,52}{4,37} = 82\%$$

4,37

6.3. Interprétation des résultats :

Les valeurs de la conversion expérimentales sont toutes inférieures à celles données par la DTSE. Ceci s'explique par le fait que ces dernières ont été calculées à une température supérieure aux températures des expériences d'hydrolyse.

Y
A
Conc. (en fibre de verreux)

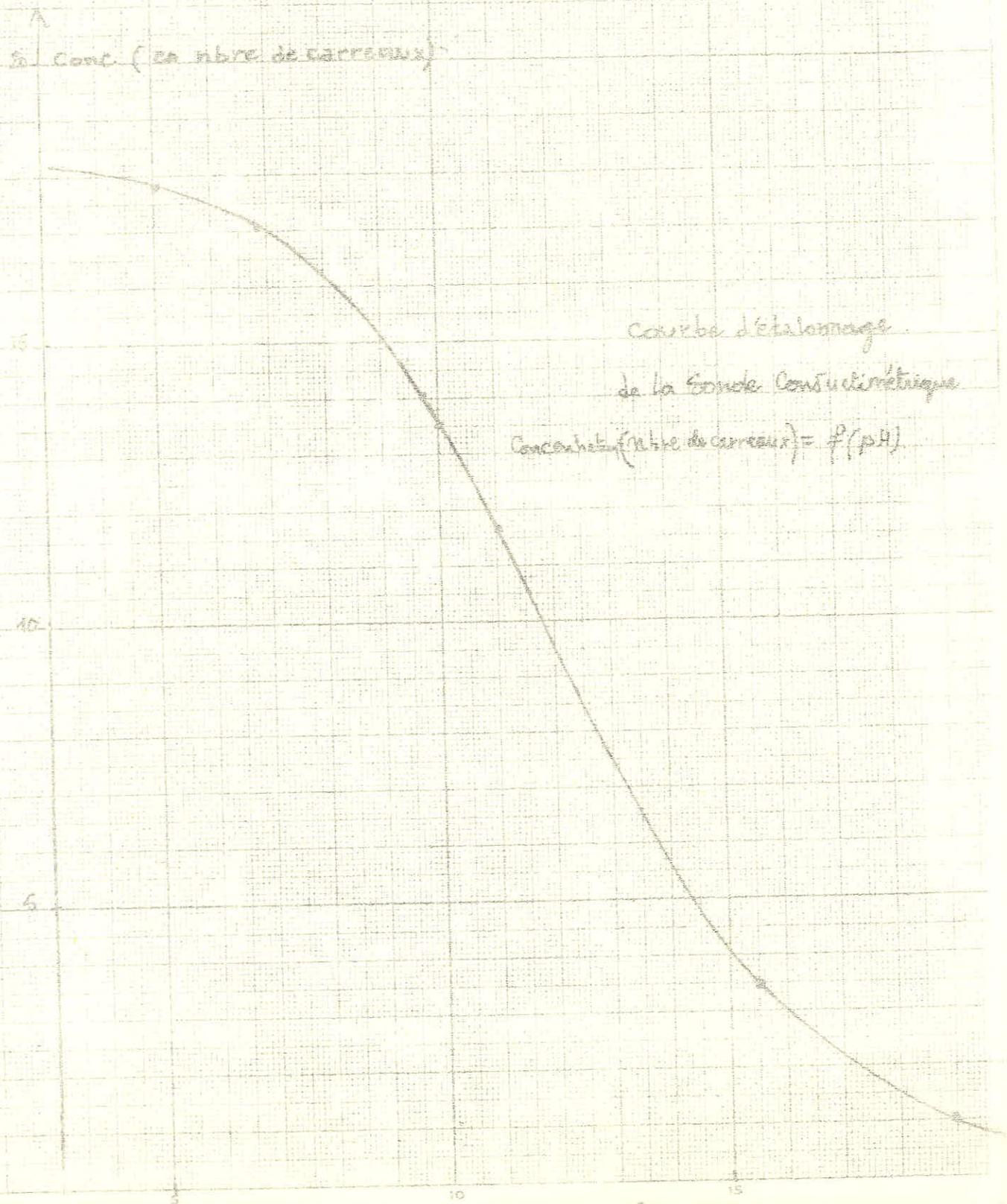
16

10

5

Courbe d'étalonnage

de la sonde conductimétrique

Conductivité (en fibre de verreux) = $f(\text{pH})$ 

Nombre de Réacteurs	J = 2		J = 4	
	Q } débits q } (l/mn)	Q = 10 q = 1	Q = 10 q = 1	Q = 20 q = 1,5
Conversion Expérimentale \bar{X}_{ep} (%)	89,3	résultat aberrant	82	72,1
Température de L'expérience	24,5 °C	24 °C	24 °C	22,5 °C
Conversion donnée par La Méthode des Traceurs	90,2	94,3	85,72	76,5

Valeurs de la Conversion expérimentale

Tableau N°8

Pour pouvoir faire la comparaison entre la théorie et l'expérience, il aurait fallu connaître la valeur de k à ces températures. Ceci est d'autant plus nécessaire que la valeur de cette constante varie très vite avec la température et dépend en outre de la force ionique du milieu.

Enfin ces valeurs de la conversion varient dans un ordre logique. Elles augmentent avec le nombre de réacteurs en série et diminuent quand le débit augmente.

Conclusion :

Les valeurs trouvées par l'expérience et à l'aide de la DTSE sont assez voisines bien que les calculs ont été faits à une température plus élevée que celle de l'expérience. Malgré tout, ces valeurs confirment que la connaissance de la DTSE dans un réacteur permet de prévoir l'avancement d'une réaction du 1er ordre : c'est un grand avantage car cela évite de faire des expériences parfois longues et coûteuses.

Conclusion générale-Suggestions et
recommandations

IV-1 Modification du montage expérimental :

IV-1.1 Le réacteur :

1°) Durant toute la durée des expériences, la cellule d'entrée n'a pas été utilisée à cause de ses dimensions réduites.

En particulier, on n'a pas pu y faire l'injection de traceur à cause du fort débit du fluide principal. Toujours pour la même raison, elle n'a pu servir pour l'alimentation en chlorure.

La cellule devait jouer le rôle de prémélangeur mais étant donné les dimensions du réacteur principal, il en faudrait une beaucoup plus grande. On en tiendra alors compte dans l'interprétation de la DTSE.

2°) Il est nécessaire de supprimer le tuyau en plexiglas qui prolonge la cellule à cause du coude à angle droit qui introduit une trop grande perte de charge. Cela permettrait d'augmenter aussi le volume géométrique du réacteur. On ferait alors une ouverture au bas du réacteur avec une cellule d'entrée de dimensions plus grandes avec trois ouvertures :

- Un pour l'arrivée du fluide principal
- Une pour l'injection de traceur
- La troisième pour l'alimentation en réactif.

IV-1.2. Tuyau d'arrivée du fluide principal :

A la sortie du rotamètre Métric 35 P, on a un brusque retrécissement, d'où une perte de charge importante, due à une tuyauterie qui comprend des robinets à pointeaux. Ce dispositif qui servait à régler le débit n'a plus de raison d'être étant donné qu'on dispose d'un rotamètre.

IV-1.3. Méthode d'injection :

C'est le point fondamental de toute étude de DTSE. Mais le problème demeure posé, l'injection avec de l'air comprimé perturbant l'écoulement et créant de grosses bulles d'air.

IV-1.4. Réglage du niveau dans le dernier bac :

La vanne existante actuellement n'est pas très indiquée pour faire un réglage approprié rapidement. Une vanne à pointeau serait préférable bien qu'elle introduise une perte de charge supplémentaire.

IV-1.5. Les agitateurs :

On mettra de préférence des agitateurs à double hélice et avec des tiges un peu plus longues pour régler correctement la hauteur h .

IV-2. Modification des paramètres d'études :

Il serait très intéressant par la suite d'étudier comment varie la qualité du mélange en fonction de la vitesse d'agitation.

Ce paramètre important pourrait être étudié en disposant d'un jeu de plusieurs poulies de diamètres différents ainsi que de courroies nécessaires. On travaillera alors dans la gamme de 500-800 tours/mn par exemple en faisant varier la vitesse de 50 t/mn chaque fois.

Il est possible de travailler à des vitesses plus élevées en utilisant des courroies de caoutchouc ou de cuir. On pourra aussi travailler à des vitesses plus basses en utilisant des courroies de caoutchouc ou de cuir.

CONCLUSION GENERALE

Malgré les conditions matérielles, précaires dans lesquelles nous avons travaillé (eau de ville non distillée et non thermostatée, manque de produits chimiques, appareillage parfois defectueux), les résultats obtenus concordent en général avec la théorie.

Cette brève étude nous a montré aussi, que le mélangeage n'est pas une opération facile, et qu'il est indispensable d'étudier très soigneusement les différents paramètres qui la régissent (en particulier la vitesse de rotation des agitateurs).

Nous avons constaté aussi que la méthode d'injection du traceur est d'une importance capitale; les résultats expérimentaux peuvent être complètement éronnés si l'on fait un mauvaise injection.

$f(x)$ UNIV E & E

- COURBES EXPERIMENTALES
- EXEMPLES DE CALCULS
- ORGANIGRAMME ET PROGRAMME
DE LA METHODE DE POWELL

INTRODUCTION

Notre problème fondamental, consiste à optimiser une fonction à deux variables, citées précédemment : $F(T1, T2)$.
 Pour cela on aura besoin des modules suivants:

Procédure de POWELL

Réduction de l'intervalle de recherche

Méthode du nombre d'or

Et éventuellement, la recherche aléatoire, pour chercher l'intervalle où la fonction est unimodale.

Les programmes à utiliser seront stockés sur disque, mais il serait préférable de les stocker séparément pour faciliter le traitement de chaque type de problème qui pourrait se poser à l'utilisateur.

Les différents modules nous les appellerons respectivement:

- 1 - POW
- 2 - REIN
- 3 - REA
- 4 - NDOR

L'organigramme général, montre l'utilisation de la méthode.

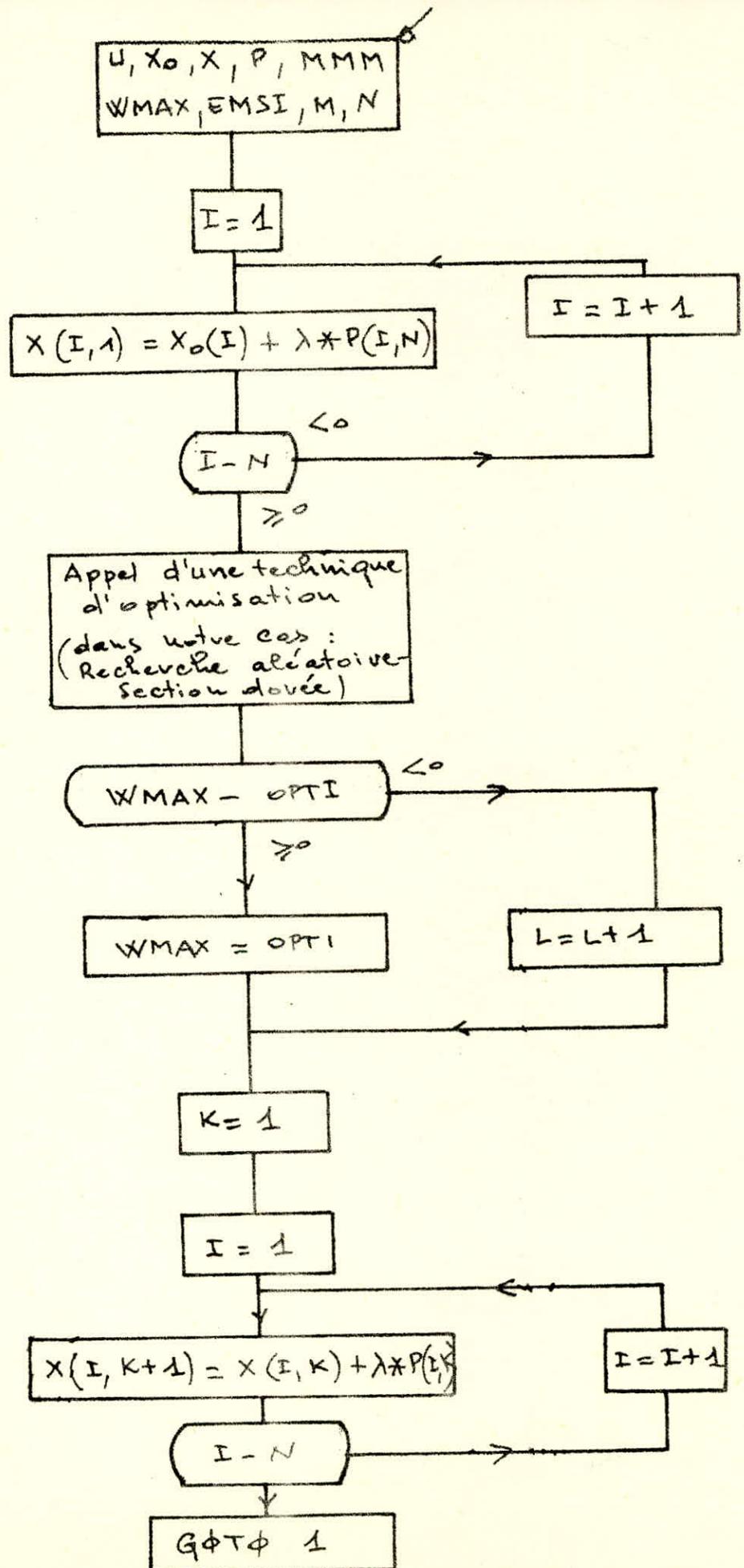
PRESENTATION DES PARAMETRES

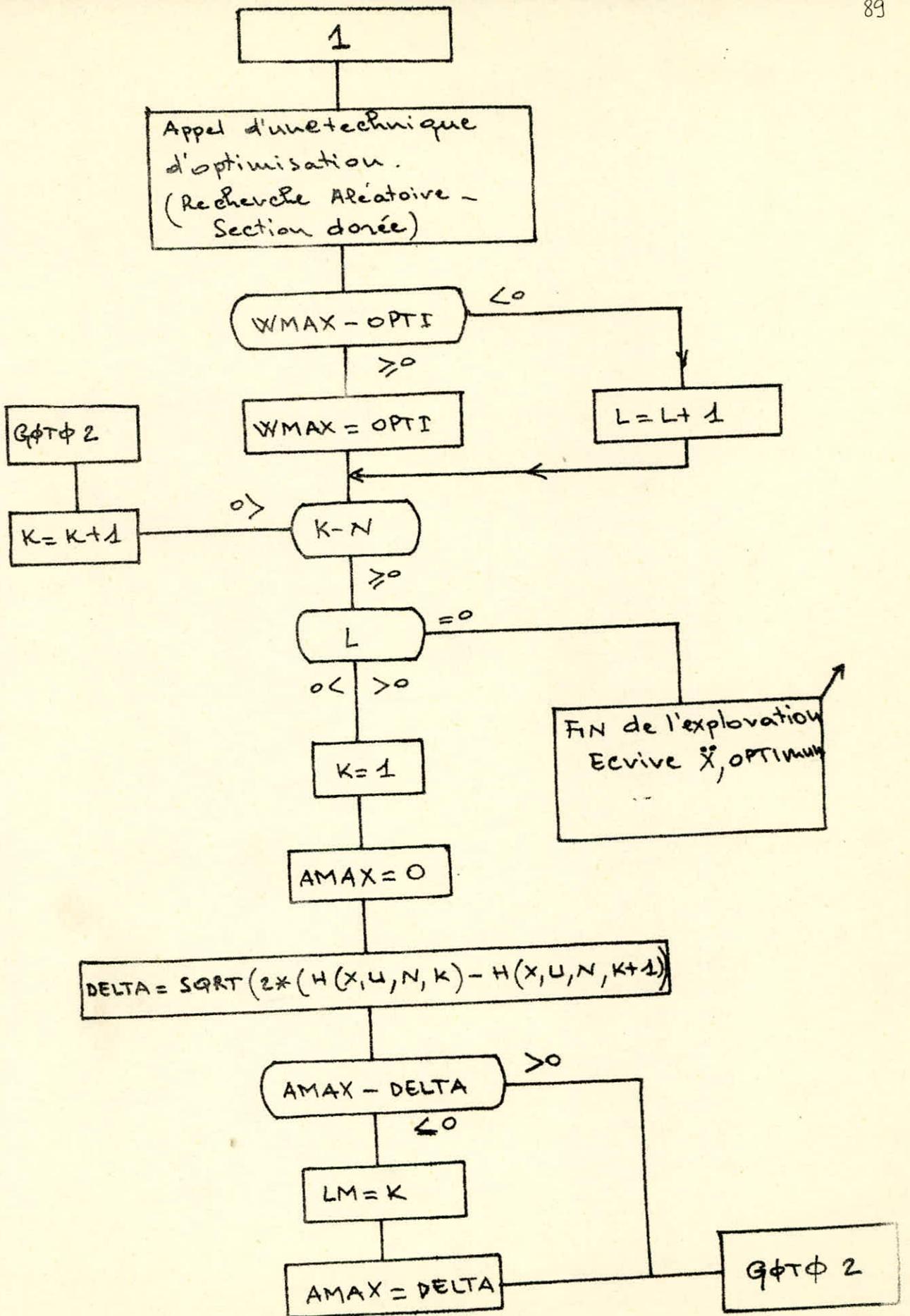
- nous allons considérer le programme général, à savoir celui qui utilise les quatre modules déjà cités:
- Réduction de l'interval de recherche.
 - Recherche aléatoire.
 - Méthode du nombre d'or.
 - Procédure de Powell.
- Nous aurons besoin de:
- A Fonction à optimiser
 - X Matrice des points optimaux au court d'un cycle (POW)
 - UX Variables
 - G Bornes de variation (REIN)
 - P Matrices de direction
 - LIP Nombre d'expériences pour déterminer l'interval d'unimodalité par la recherche aléatoire.
 - MMI Nombre d'itération (POW)
 - EXI Paramètres de contraction de l'interval.
 - EPS Erreur sur l'optimum (NDOR)
 - EMSI Erreur sur l'optimum (POW)
 - EPSI Erreur sur l'optimum (RA)
 - N Nombre de variables

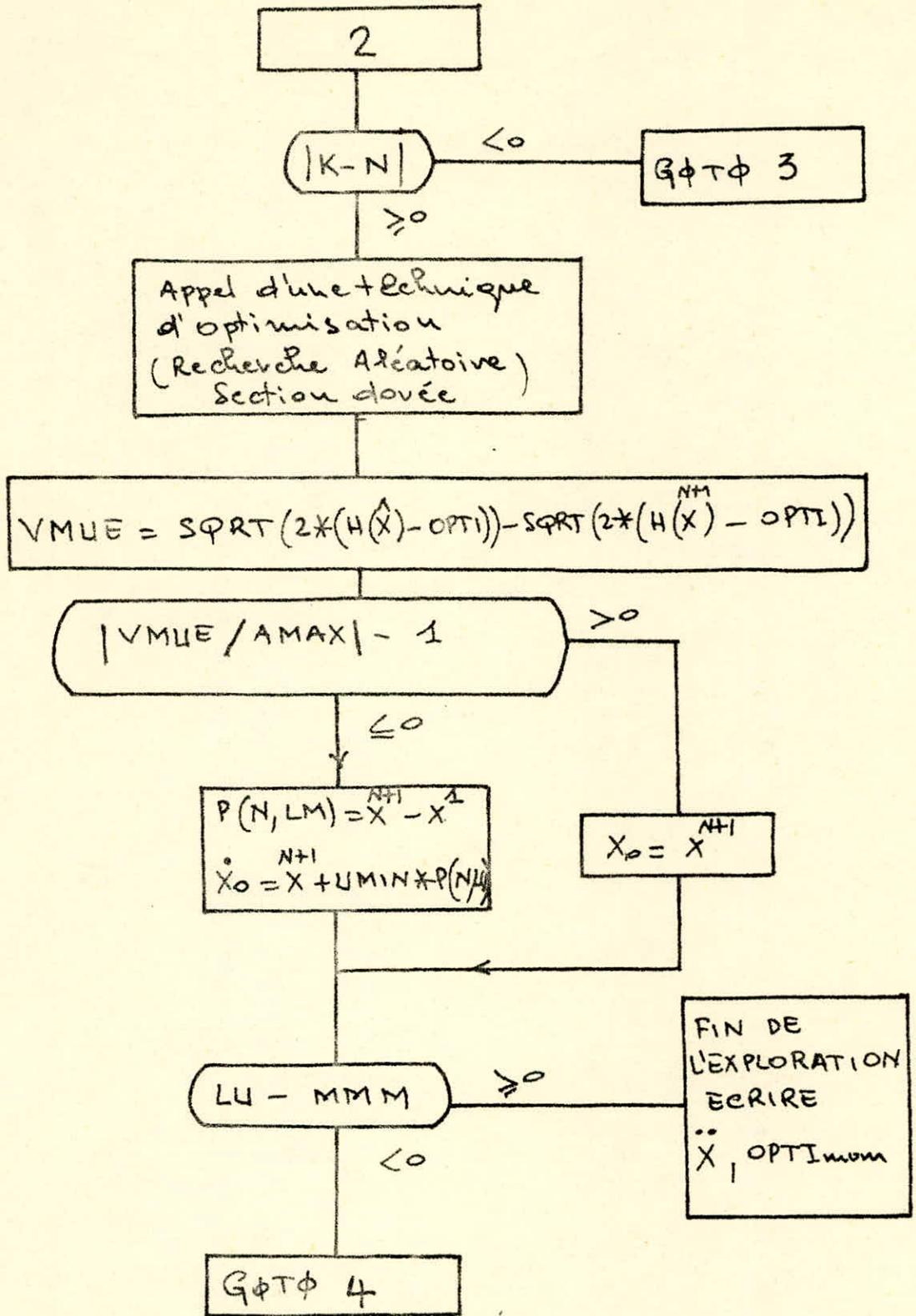
CARTES DE CONTROLE

Tous nos programmes ont été étudiés sur ordinateur IBM 1130, nous indiquons les cartes de contrôles utilisées:

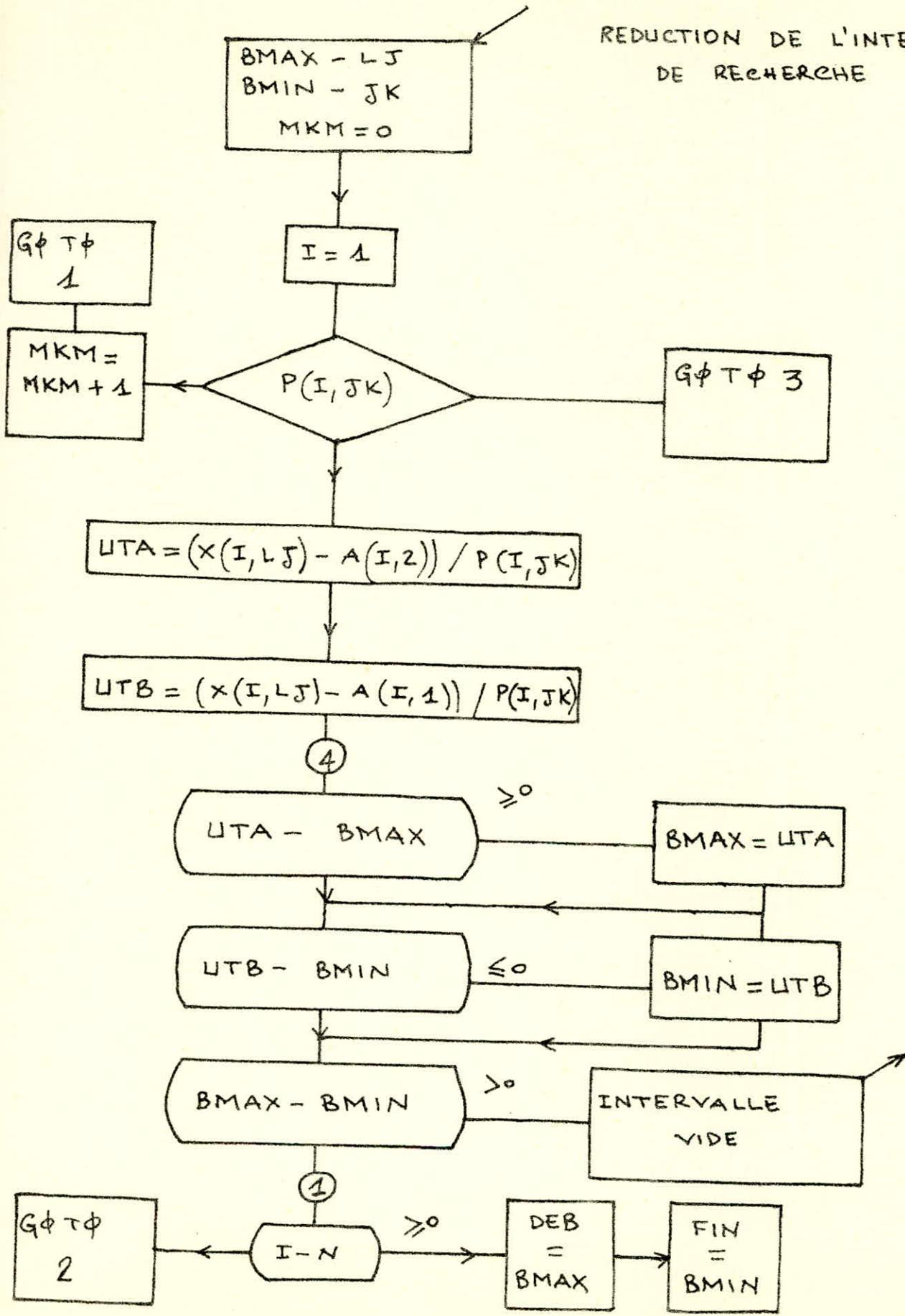
```
// JOB
// FOR
*IOCS(CARD,1132)PRINTER)
LIST SOURCE PROGRAM
C      :      commentaires,noms,...etc
      :      PROGRAMME
      :
// XEQ
CALL EXI
// XEQ
Données éventuelles
```

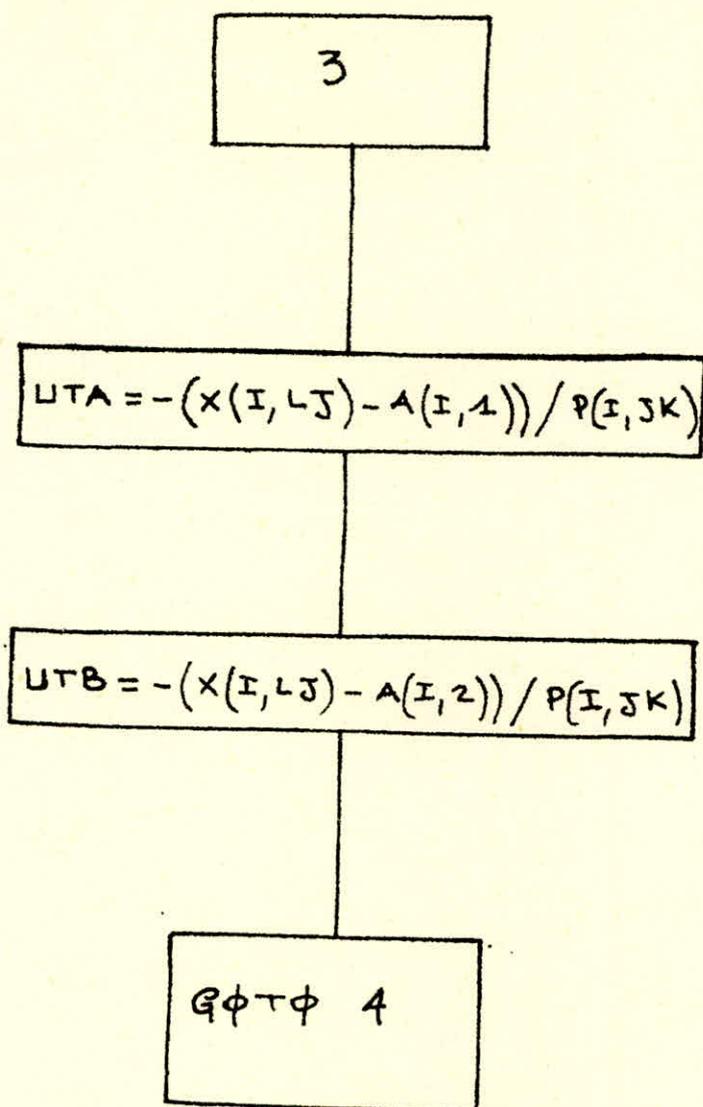




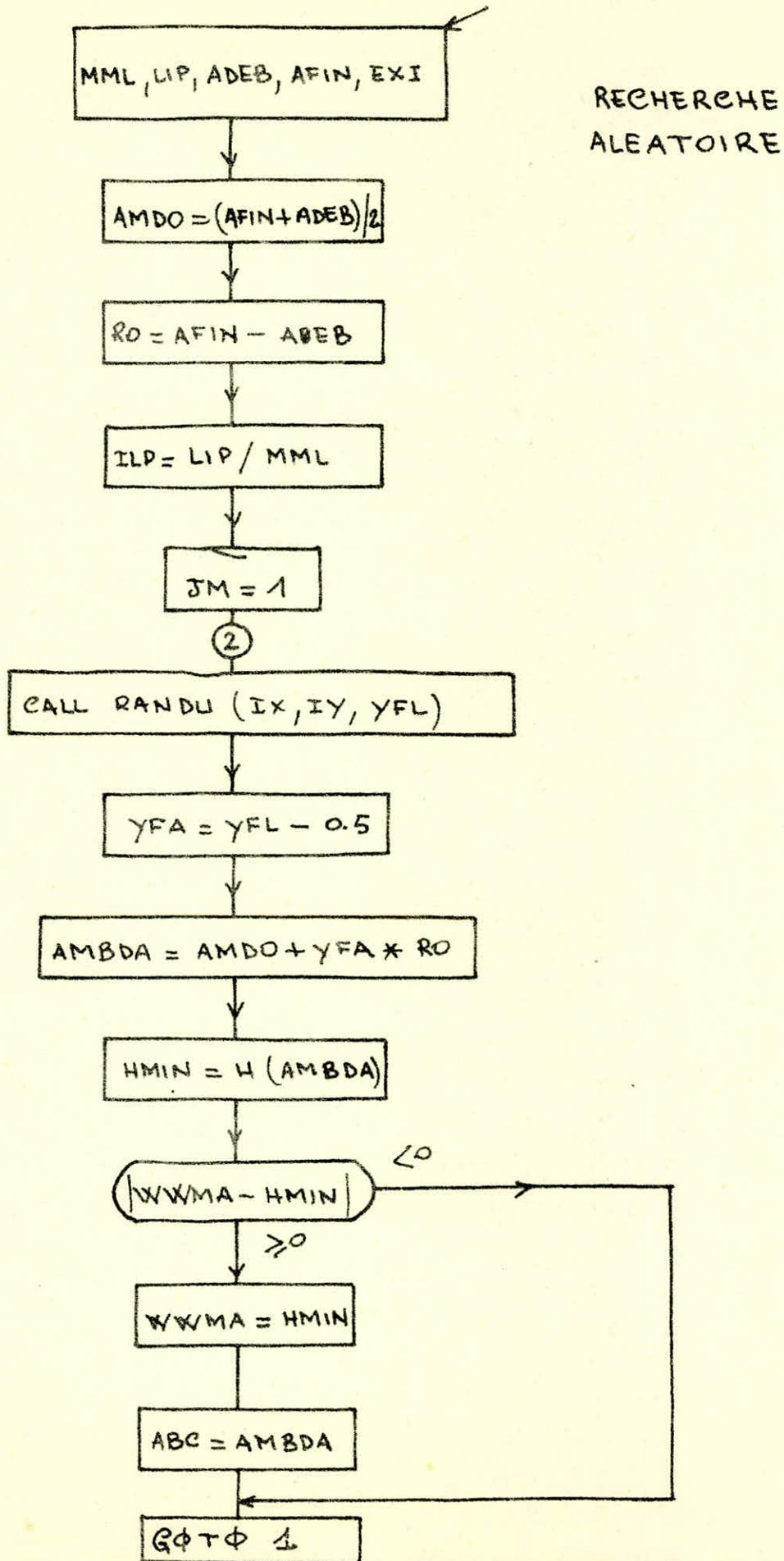


REDUCTION DE L'INTERVALLE
DE RECHERCHE

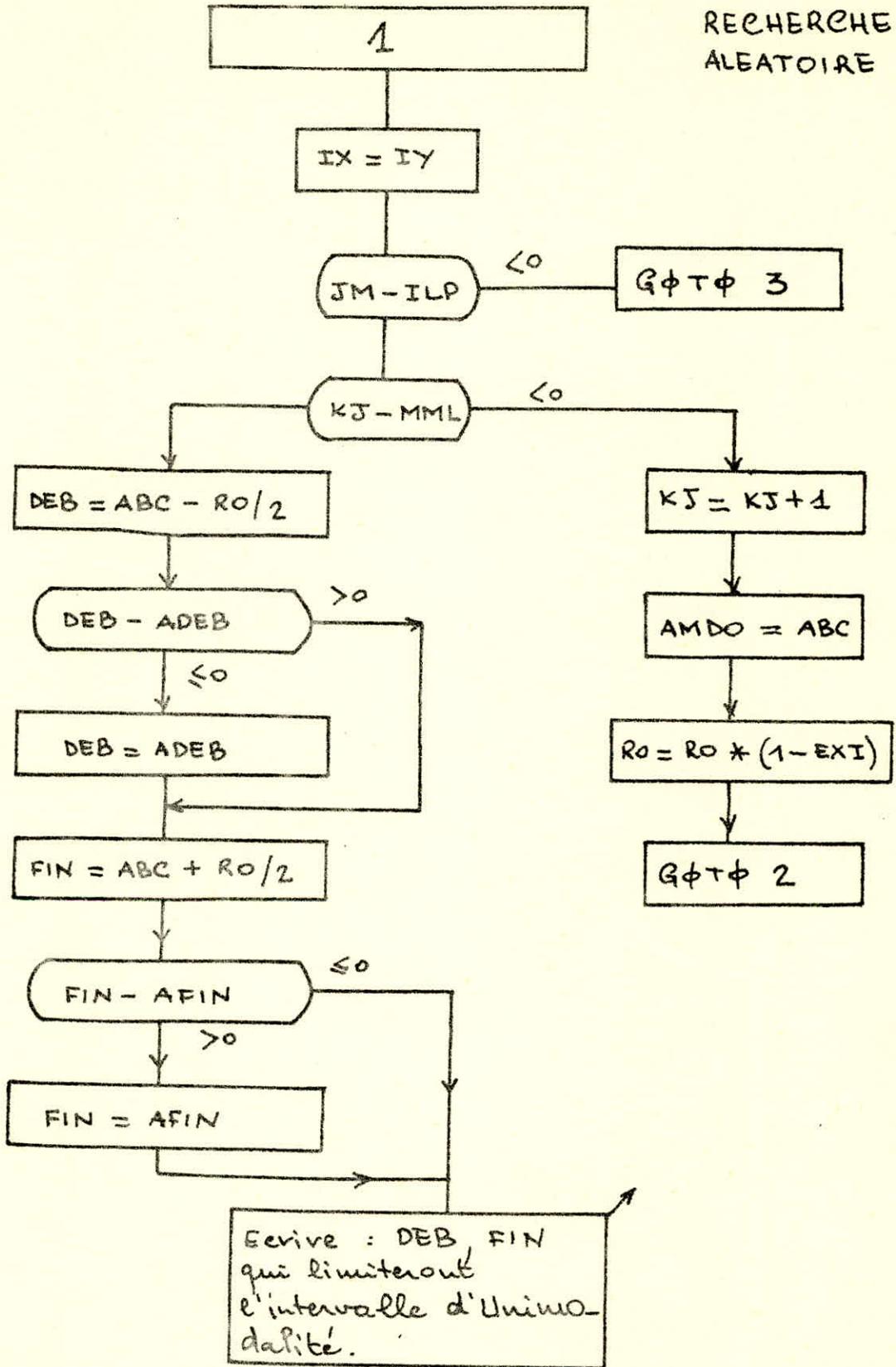




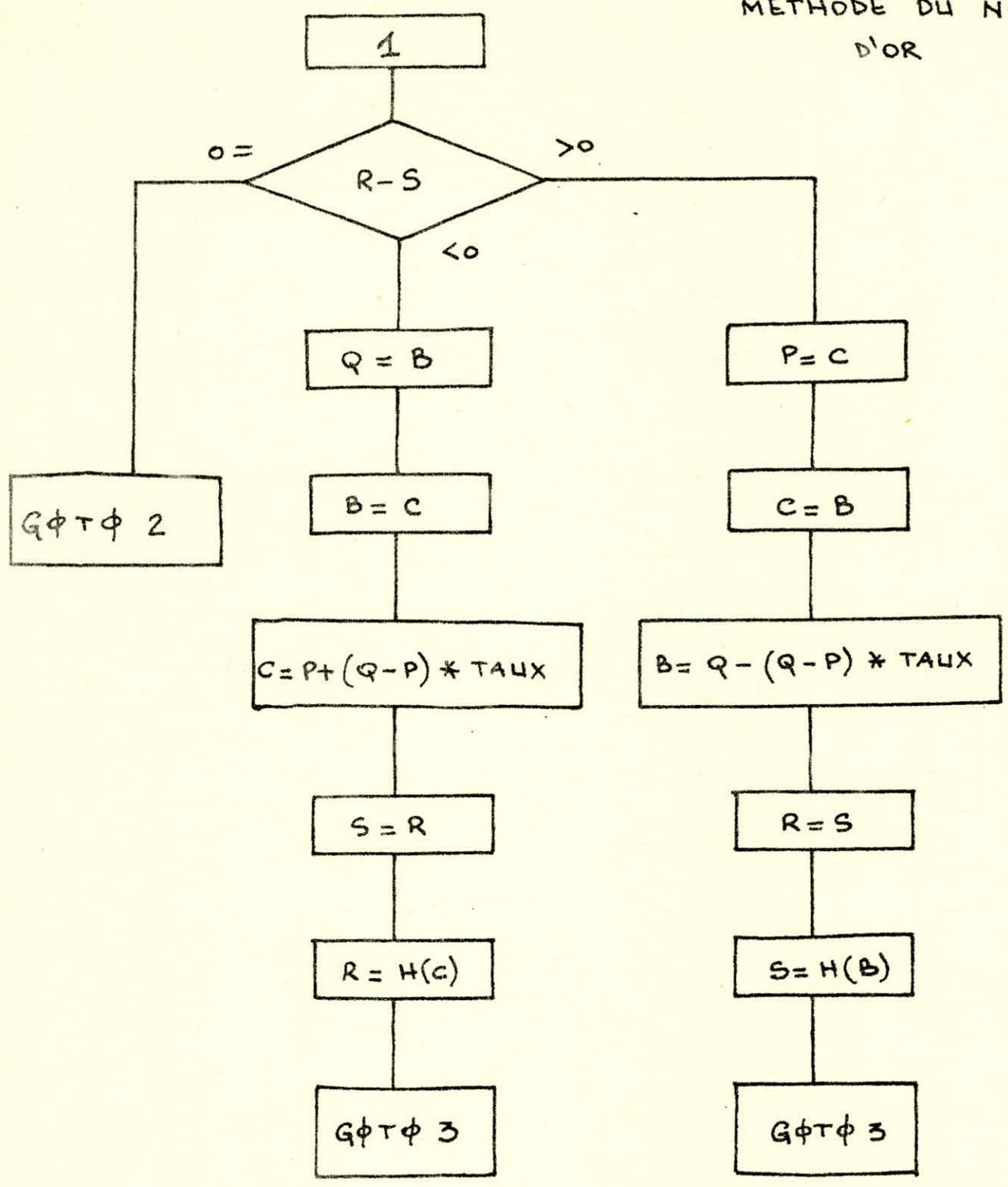
REDUCTION DE LINTERVALLE
DE RECHERCHE



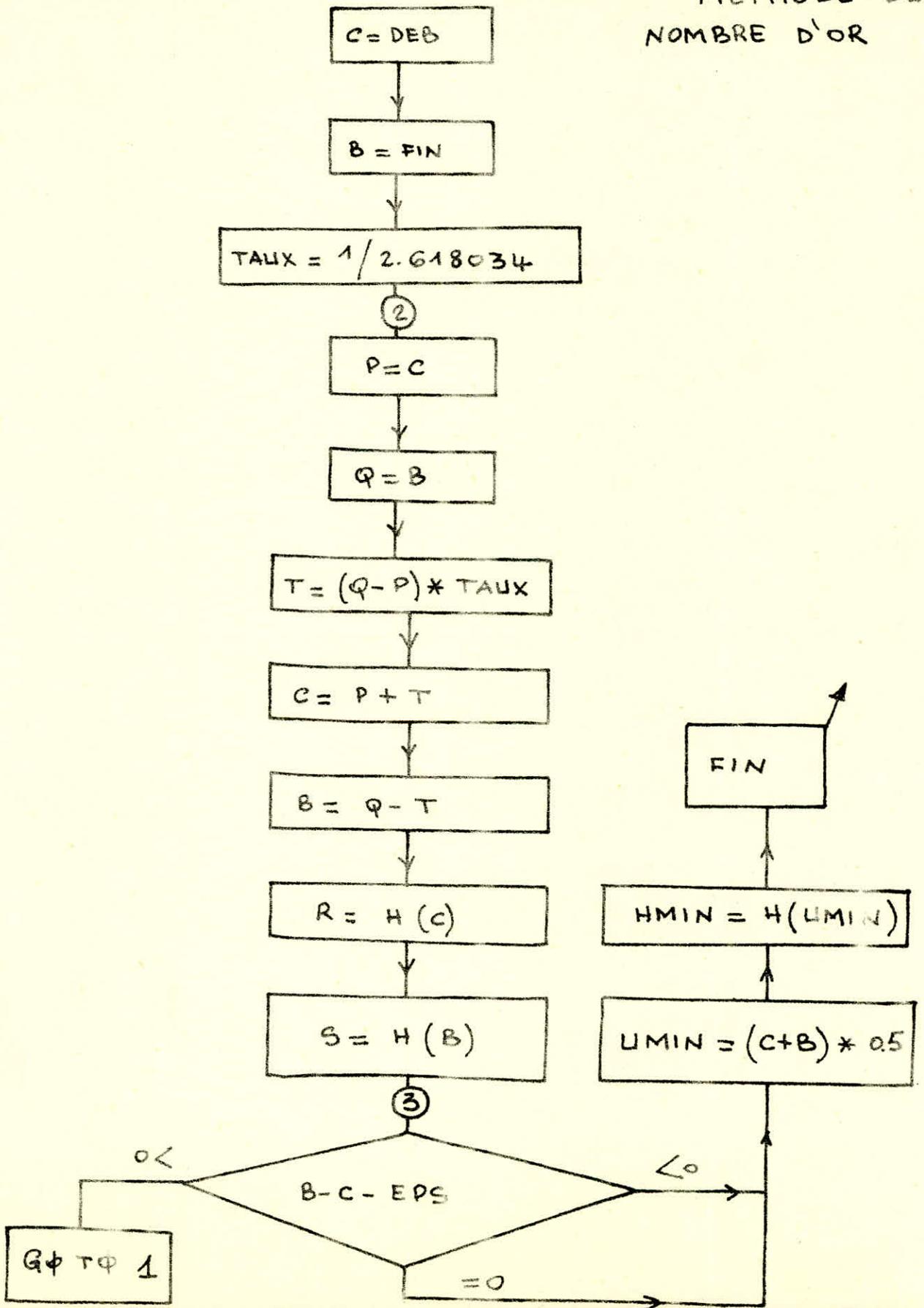
RECHERCHE
ALEATOIRE



METHODE DU NOMBRE D'OR



METHODE DU
NOMBRE D'OR



PROGRAMME : Méthode de Powell

```

// JOB
// FOR
* ONE WORD INTEGERS
* LIST SOURCE PROGRAMM
  SUBROUTINE REIN ( X, P, G, LJ, JK, DEB, FIN, MKM )
  REDUCTION DE L'INTERVALLE DE RECHERCHE
  DIMENSION X(2,4) , P(2,2) , G(2,2)
  N=2
  MKM=1
  MLM=0
  BMIN=32100.
  BMAX=-32100.
  Dφ 101 LM=1, N
  IF ( P(LM, JK) 102, 101, 104
104  UTA = -(X(LM, LJ) - G(LM, 1)) / P(LM, JK)
      UTB = -(X(LM, LJ) - G(LM, 2)) / P(LM, JK)
      MLM = MLM + 1
      GφTφ 105
102  UTA = (X(LM, LJ) - G(LM, 2)) / P(LM, JK)
      UTB = (X(LM, LJ) - G(LM, 1)) / P(LM, JK)
      MLM = MLM + 1
      IF (UTA - BMAX) 106, 107, 107
107  BMAX = UTA
106  IF (UTB - BMIN) 108, 108, 109
108  BMIN = UTB
109  IF (BMAX - BMIN) 101, 101, 101
101  CφNTINUE
      IF (MLM) 103, 101, 103
  C  DEB = DEBUT DE L'INTERVALLE
103  DEB = BMAX
      FIN = BMIN
      WRITE (3,2) FIN, DEB
  2  FφRMAT (5X, 2(F7.2, 2X))
      GφTφ 111
101  WRITE (3,3)

```

```

3      FORMAT (X, ' INTERVALLE VIDE ' )
      MKM = 0
111    RETURN
      END

// DUP
* STORE      WS      UA      REIN
* DELETE                                REA
// FOR
* ONE WORD INTEGERS
* LIST SOURCE PROGRAM

SUBROUTINE REA (X, P, LJ, JK, LIP, MML, EXI, ADEB, AFIN, DEB -
FIN, A, N, Y, T)

C      DETERMINATION DE L'INTERVALLE D'UNIMODALITE PAR RE-REA
DIMENSION X(2,4) , P(2,3) , VX(2)
DIMENSION Y(80) , T(80)
WWMA = 32767.
ILP = LIP / MML
N = 2
IX = 99
KJ = 1
AMDφ = (AFIN + ADEB) / 2.
Rφ = AFIN - ADEB
2004   Dφ 2000 JM = 1, ILP
      CALL RANDU (IX, IY, YFL)
      YFA = YFL - 0.5
      AMBDA = AMDφ + YFA * Rφ
      Dφ 2013 NY = 1, N
2013   VX (NY) = X (NY, LJ) + AMBDA * P (NY, JK)
      HMIN = A (VX, Y, T)
      IF (WWMA - HMIN) 2005, 2006, 2006
2006   WWMA = HMIN
      ABC = AMBDA
2005   IX = IY
2000   CONTINUE
      IF (KJ - MML) 2002, 2007, 2007
2002   KJ = KJ + 1
      AMBDAφ = ABC
      Rφ = Rφ + (1.0 - EXI)
      GφTφ 2004
2007   DEB = ABC - Rφ / 2

```

```

IF (DEB - ADEB) 2008, 2008, 2009
C   DEB = DEBUT DE L'INTERVALLE POUR SECTION DORÉE
2008 DEB = ADEB
2009 FIN = ABC + RΦ/e
    IF (FIN - AFIN) 2011, 2011, 2010
C   FIN = FIN DE L'INTERVALLE POUR SECTION DORÉE
2010 FIN = AFIN
2011 WRITE (3, 2001) DEB, FIN
2001 FORMAT (15X, 'DEB = 2X, F10.5, 5X, 'FIN = 2X, F10.5)
    RETURN
    END

// DUP
* STΦRE WS UA REA
* DELETE NBOR

// FΦR NBOR
* ΦNE WΦRD INTEGERS
* LIST SOURCE PROGRAM
*   RECHERCHE D'OPTIMUM SUR UN SEGMENT VIA SECTION DORÉE
SUBROUTINE NBOR (X, P, A, L, J, K, HMIN, UPIN, DEB, FIN, Y, T)
DIMENSION Y(20), T(80)
DIMENSION UX(2), X(2,4), P(2,3)
EPS = 0.01
N = 2
LEC = 3
C = DEB
B = FIN
TAUX = 1. / 2.618034
100  Z = C
    Q = B
    E = (Q - Z) * TAUX
    C = Z + E
    B = Q - E
DΦ 110 KW = 1, N
110  UX(KW) = X(KW, L, J) + C * P(KW, J, K)
    R = A(Y, UX, T)
DΦ 111 KW = 1, N
111  UX(KW) = X(KW, L, J) + B * P(KW, J, K)
    WRITE (3, 1000) B, C
    S = A(Y, UX, T)
C   TEST DE PRECISION
200  IF (B - C - EPS) 60, 60, 70
C   EMPLACEMENT PROCHAINE EXPERIENCE
70  IF (R - S) 10, 20, 30
20  QΦ TΦ 100

```

```

30   Z=C
      C=B
      B=Q-(Q-Z)*TAUX
      WRITE (3,1000) B,C
      R=S
      DØ 120   KW=1,N
120  UX(KW)=X(KW,LS)+B*P(KW,JK)
      S=A(UX,Y,T)
      GØTØ 200
10   Q=B
      B=C
      C=Z+(Q-Z)*TAUX
      WRITE (3,1000) B,C
      S=R
      DØ 121   KW=1,N
121  UX(KW)=X(KW,LS)+C*P(KW,JK)
      R=A(Y,UX,T)
      GØTØ 200
60   UMIN=(B+C)*0.5
      DØ 131   KW=1,N
      UX(KW)=X(KW,LS)+UMIN*P(KW,JK)
131  X(KW,LS+1)=UX(KW)
      C   PRINT OPTIMAL
      WRITE (3,41) (UX(KW),KW=1,2)
41   FORMAT (5X,2(F9.5,2X))
      C   OPTIMUM
      HMIN=A(UX,Y,T)
      WRITE (LEC,40) UMIN,HMIN
40   FORMAT (5X,F6.3,4X,F7.3 //)
1000 FORMAT (2(F8.4,4X))
      RETURN
      END

```

```

// DUP
* STORE      WS  UA  NBOR
* DELETE      A
// FOR      A (= EXEMPLE DE FONCTION)
* ONE WORD INTEGERS
* LIST  SOURCE PROGRAM
**      EXEMPLE DE FONCTION
      FUNCTION A(X,Y,T)
      DIMENSION X(2), Y(80), T(80)
      A=0.

```

```

DΦ 299 I = 1, 80
H = Y(I)
P = EXP(-T(I) / X(1))
Q = EXP(-T(I) / X(2))
Z = H - (P - Q) / (X(1) - X(2))
A = A + Z * * Z
299 CONTINUE
RETURN
END

// DUP
* STORE WS UA A
// FOR EVERT
* IDES (CARD, 1132 PRINTER)
* ONE WORD INTEGERS
* LIST ALL
* NAME EVERT
EXTERNAL A
DIMENSION X(2,4), P(2,3), G(2,2), UX(2)
DIMENSION Y(80), T(80)
JREA = 1
MPL = 2
LIP = 600
EXI = 0.5
N = 2
EMSI = 0.001
LM = 0
Π = 1
L = 0
LJ = 1
JK = 2
WMAX = 32767.
LU = N + 1
LW = N + 2
1001 READ (2, 1001) ((X(I,J), J=1, LW), I=1, N)
FORMAT (4F4.1)
1002 READ (2, 1002) ((P(I,J), J=1, LW), I=1, N)
FORMAT (3F4.1)
READ (2, 1) ((G(I,J), J=1, N), I=1, N)
1 FORMAT (4F7.3)
READ (2, 100) (Y(I), I=1, 80)
100 FORMAT (6(F8.6))
READ (2, 101) (T(I), I=1, 80)
101 FORMAT (6(F5.1))
MN = 0
CALL REIN (X, P, G, LJ, JK, DEB, FIN, MKM)
IF (MKM) 26, 33, 26
C INITIALISATION

```

```

26 IF (JREA) 47, 46, 47
47 ADEB = DEB
   AFIN = FIN
   CALL REA (X, P, LJ, JK, LIP, HML, EXI, ADEB, AFIN, DEB, FIN, Y, T)
46 CALL NBOB (X, P, A, LJ, JK, HMIN, UMIN, DEB, FIN, Y, T)
   IF (WMAX - HMIN) 33, 33, 12
12 IF (ABS (WMAX - HMIN) - EPSI) 13, 13, 33
13 WMAX = HMIN
   L = L + 1
   LOP = 2
33 Dφ 14 K = 2, LU
C PROCEDURE D'OPTIMISATION
CALL REIN (X, P, G, K, K-1, DEB, FIN, MKM)
IF (MKM) 34, 14, 34
34 IF (JREA) 48, 48, 48
48 ADEB = DEB
   AFIN = FIN
   CALL REA (X, P, K, K-1, LIP, HML, EXI, ADEB, AFIN, DEB, FIN, A, Y, T)
49 CALL NBOB (X, P, A, K, K-1, HMIN, UMIN, DEB, FIN, Y, T)
   IF (WMAX - HMIN) 14, 14, 16
16 IF (ABS (WMAX - HMIN) - EPSI) 11, 11, 14
11 WMAX = HMIN
   LOP = K + 1
   L = L + 1
14 CONTINUE
   IF (L) 17, 98, 17
C RECHERCHE D'UNE NOUVELLE DIRECTION CONJUGUEE
17 AMAX = 0.
   Dφ 18 K = 2, N
   BTA = 0.
   Dφ 27 MU = 1, N
27 UX (MU) = X (MU, K)
   BTA = -BTA - A (Y, X, T)
   Dφ 28 MU = 1, N
28 UX (MU) = X (MU, K+1)
   BTA = -BTA - A (Y, X, T)
   DELTA = SQRT (BTA)
   IF (AMAX - DELTA) 19, 19, 18
19 LM = K
   AMAX = DELTA
18 CONTINUE
   Dφ 21 MU = 1, N
21 P (MU, N+1) = X (MU, N+1) - X (MU, 2)
   CALL REIN (X, P, G, N+1, N+1, DEB, FIN, MKM)
   IF (MKM) 35, 36, 35
35 IF (JREA) 51, 52, 51
51 ADEB = DEB
   AFIN = FIN

```

```

CALL REA (X,P,NH,NH,LIP,MML,EXI,ADBB,AFIN,DEB,FIN,Y,T,A)
52 CALL NBOE (X,P,A,NH,NH,HMIN,UMIN,DEB,FIN,Y,T)
   QPTQ 37
36 DQ 38 MU=1,N
38 UX(MU) = X(MU,N+1)
   HMIN = A(Y,UX,T)
37 DQ 29 MU=1,N
29 UX(MU) > X(MU,2)
   VMA = SQRT(A(Y,UX,T) - HMIN)
   DQ 31 MU=1,N
31 UX(MU) = X(MU,N+1)
   VMB = SQRT(A(Y,T,UX) - HMIN)
   VMUE = VMA - VMB
   IF (ABS(VMUE/AMAX) - 1.) 22,23,23
23 DQ 24 MU=1,N
   P(MU,LM) = X(MU,N+1) - X(MU,2)
24 X(MU,1) = X(MU,N+1) + UMIN * P(MU,LM)
   L=0
   MN = MN+1
   WRITE (3,43) MN, LQ P
   WRITE (3,44) ((P(I,J), J=1,LU), I=1,N)
   QPTQ 26
22 DQ 25 MU=1,N
25 X(MU,1) = X(MU,N+1)
   L=0
   MN = MN+1
   WRITE (3,43) MN, LQ P
   WRITE (3,44) ((P(I,J), J=1,LU), I=1,N)
   QPTQ 26
C   ECRITURE DE L'OPTIMUM
38 DQ 32 MU=1,N
32 UX(MU) = X(MU,1)
C   OPTIMUM
   OPTI = A(Y,UX,T)
   WRITE (3,42) OPTI
42 FFORMAT (15X, F9.5 //)
C   PRINT OPTIMAL
   WRITE (3,41) (UX(MU), MU=1,N)
41 FFORMAT (5X, 2(F6.3, 4X))
43 FFORMAT (15X, 2(I3, 5X) //)
44 FFORMAT (15X, 3(F8.2) //)
CALL EXIT
END
// XEQ.

```

$F \cdot 10^2$	$\int c dt = F \times S$	t (sec)	$10^2(1-F)$	$\lambda \cdot 10^3$	$I \cdot 10^3$
1,29	1	40	98,71	0,526	637
2,58	2	60	97,42	1,52	629
9,03	7	80	90,97	5,03	587
19,74	15,3	100	80,26	7,2	518
31,6	24,5	120	68,4	9,24	447
44,77	34,7	140	55,23	11,44	356
57,16	44,3	160	42,84	13,77	276
77,03	59,7	200	22,97	19,4	148
89,8	69,6	240	10,2	18,33	65,8
92,25	71,5	260	7,74	12,4	49,9
95,48	74	300	4,52	14,16	29,2
97,93	75,9	340	2,07	21,7	13,4
93,75	72,66	280	6,25	12,9	40,4

Calcul de la Courbe Intensité $\lambda(t)$
à partir de la Courbe $c(t)$
pour 3 Réacteurs égaux
en Série

$Q = 20 \text{ l/min}$
 $S = 1550 \text{ Unités}$

TABLEAU N° 6

$V=60\ell$	$Q=20 \frac{\ell}{\text{min}}$	$t=180 \text{ sec}$	$S=1550$ unités	$\sigma_i = \frac{W_i}{E}$	$E_{oi} = \bar{E} E_i$	$\sigma_o^2 = \frac{\sigma_i^2}{E^2}$	$J = \frac{1}{\sigma_o^2}$
$t \text{ (sec)}$	$C_i \text{ (cm)}$	$\frac{C_i}{S} 10^3 = E_i 10^3$	$E_i C_i \Delta t$	$E_i C_i^2 \Delta t$	σ_i	E_{oi}	$E_i \bar{E} \cdot 10^3$
10	0	0	0	0	0	0	0
20	0,2	0,129	0,0516	1,032	0,139	0,02	0,1022
30	0,6	0,387	/	/	/	/	/
40	0,8	0,52	0,416	16,64	0,258	0,08	0,327
50	1,15	0,74	/	/	/	/	/
60	2,3	1,48	1,776	106,56	0,588	0,23	0,737
80	7,1	4,58	7,32	585,6	0,517	0,71	1,809
100	9	5,8	11,6	1160	0,646	0,9	1,815
110	9,55	6,16	/	/	/	/	/
120	9,8	6,32	15,17	1820,4	0,774	0,98	1,567
130	9,8	6,32	/	/	/	/	/
140	9,8	6,32	17,67	2473,8	0,904	0,98	1,245
160	9,2	5,9	18,88	3020,8	1,034	0,91	0,9204
180	8,25	5,32	19,15	3447	1,163	0,88	0,6596
200	6,8	4,39	17,56	3512	1,292	0,68	0,4302
220	4,9	3,16	13,90	3058	1,42	0,49	0,2465
240	2,9	1,87	8,97	2152,8	1,55	0,99	0,1156
260	1,5	0,96	4,92	1279,2	1,68	0,15	0,047
280	1,25	0,806	4,514	1263,92	1,81	0,125	0,0314
300	1	0,64	3,84	1152	1,94	0,1	/
320	0,9	0,58	3,712	1187,84	2,068	0,09	/
340	0,7	0,45	3,06	1040,4	2,196	0,07	/
360	0,5	0,32	2,3	828	2,33	0,05	/

EXEMPLE DE
CALCULS
pour 3 réacteurs
égaux en série

$$\Sigma = 154,8$$

$$\Sigma = 28106$$

$$\bar{E} = 154,8$$

$$\sigma^2 = 4142,96$$

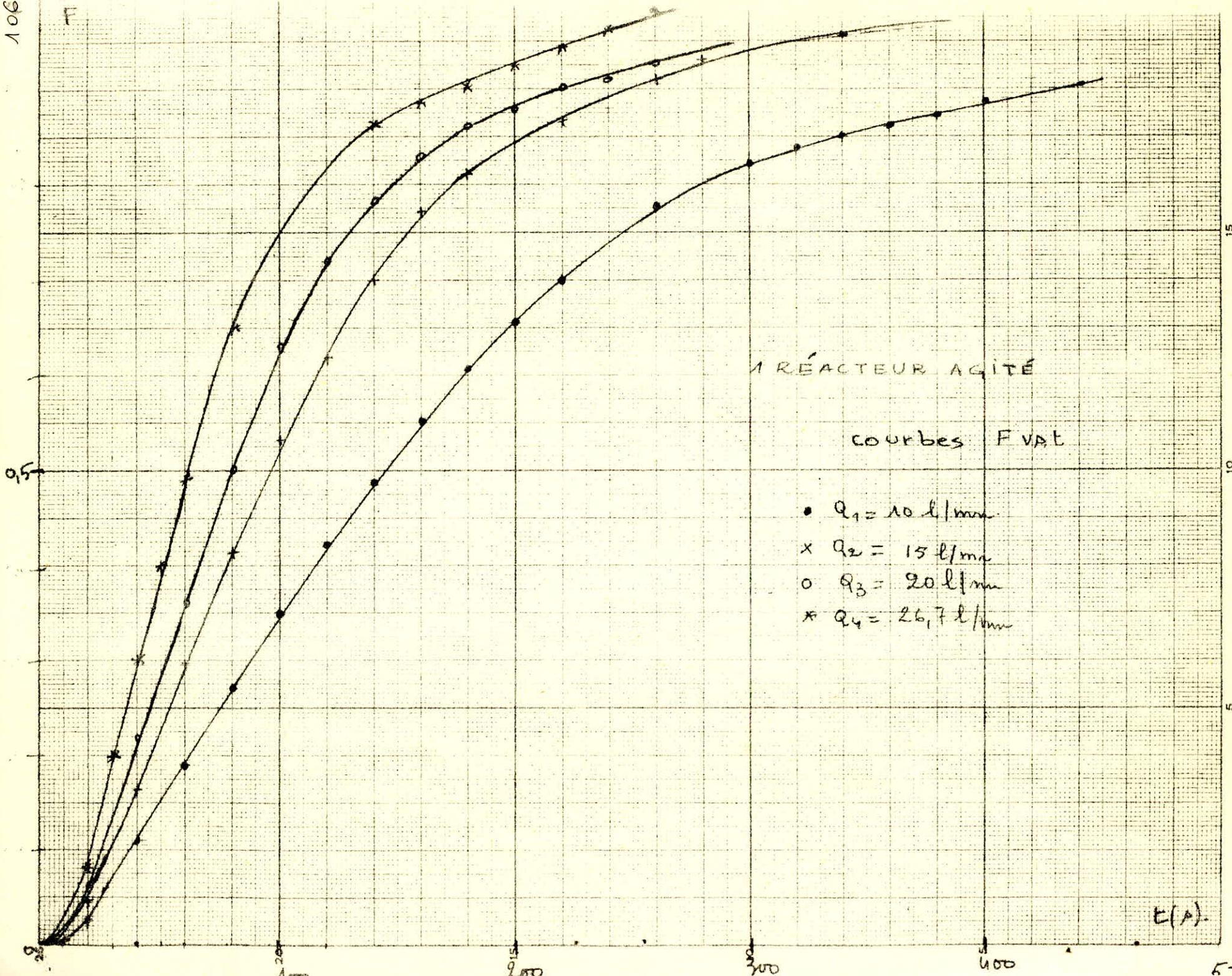
$$\sigma_o^2 = 0,173$$

$$\Sigma = 10,052$$

$$X = 80\%$$

$$J = 3,43$$

F



0.5

100

200

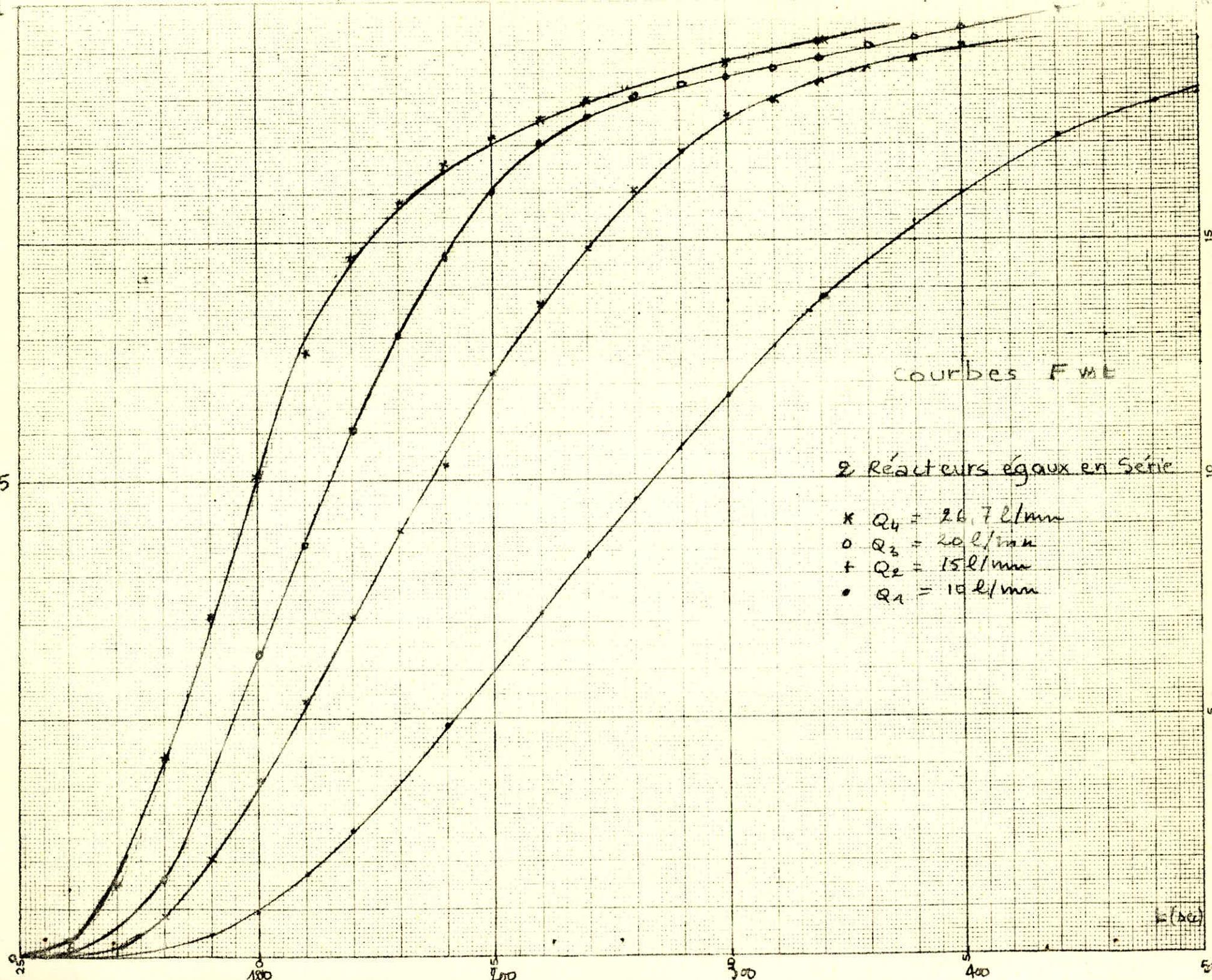
300

400

500

107

0,5

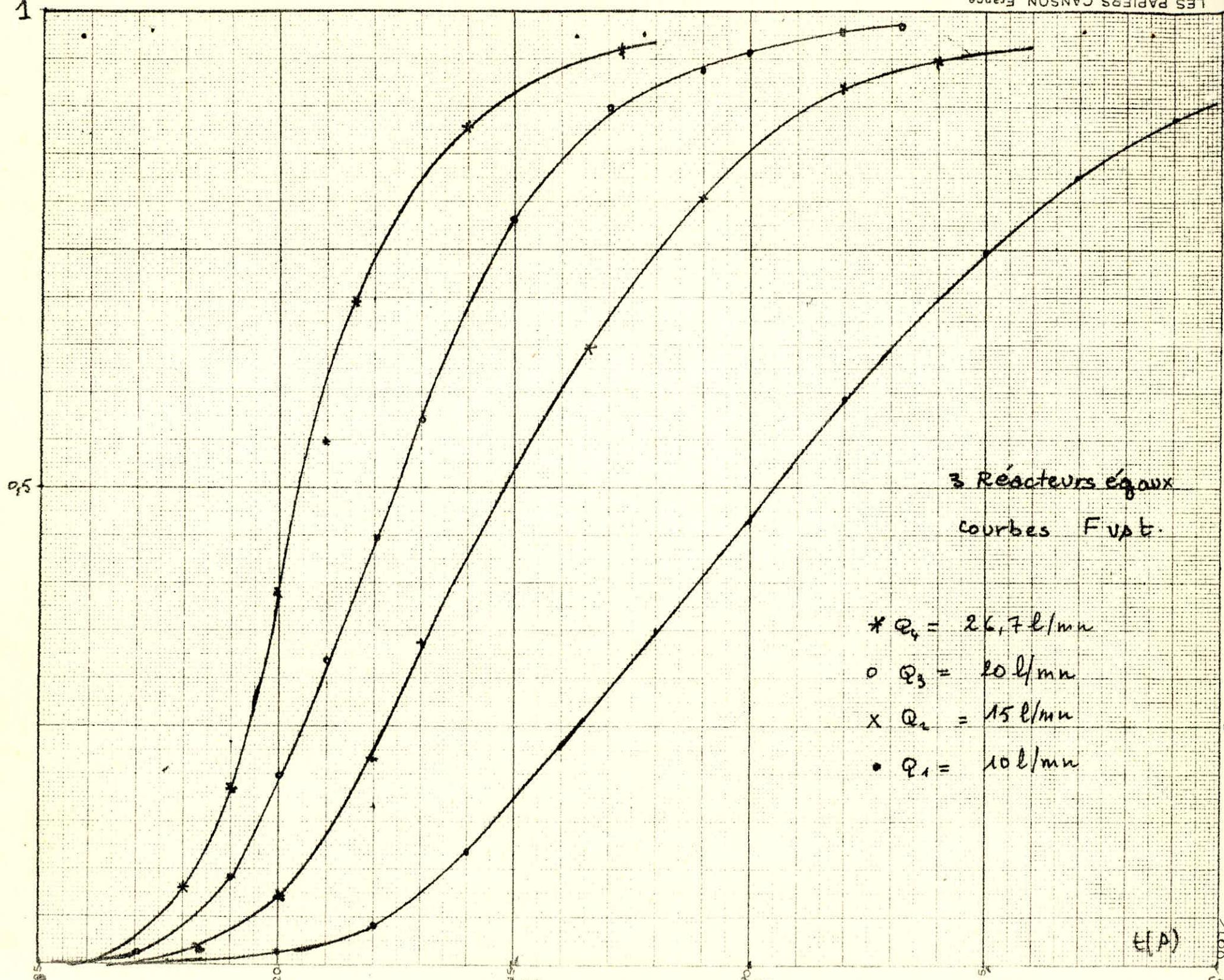


courbes F vs t

2 Réacteurs égaux en Série

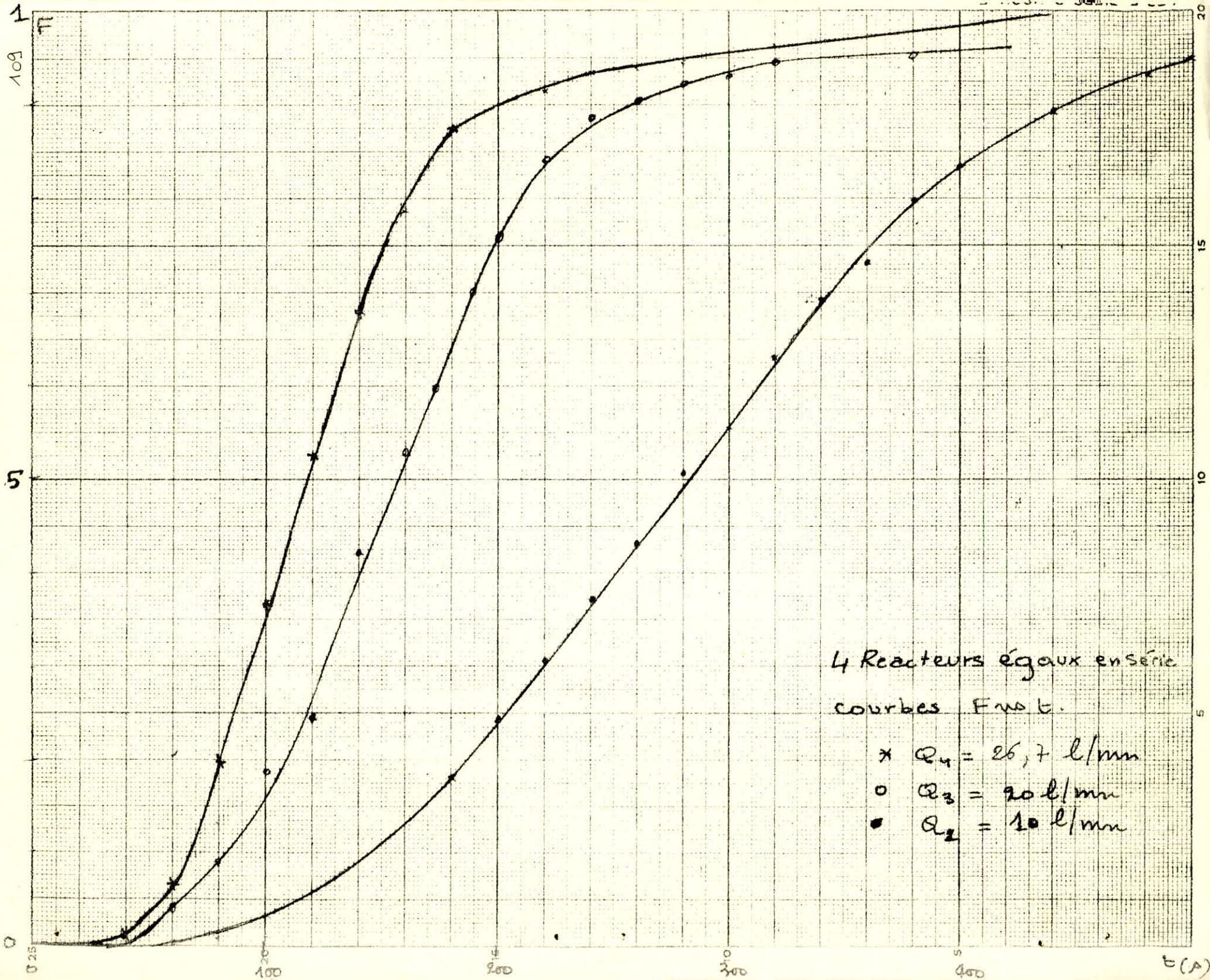
- \times $Q_4 = 26,7 \text{ l/min}$
- o $Q_3 = 20 \text{ l/min}$
- $+$ $Q_2 = 15 \text{ l/min}$
- \bullet $Q_1 = 10 \text{ l/min}$

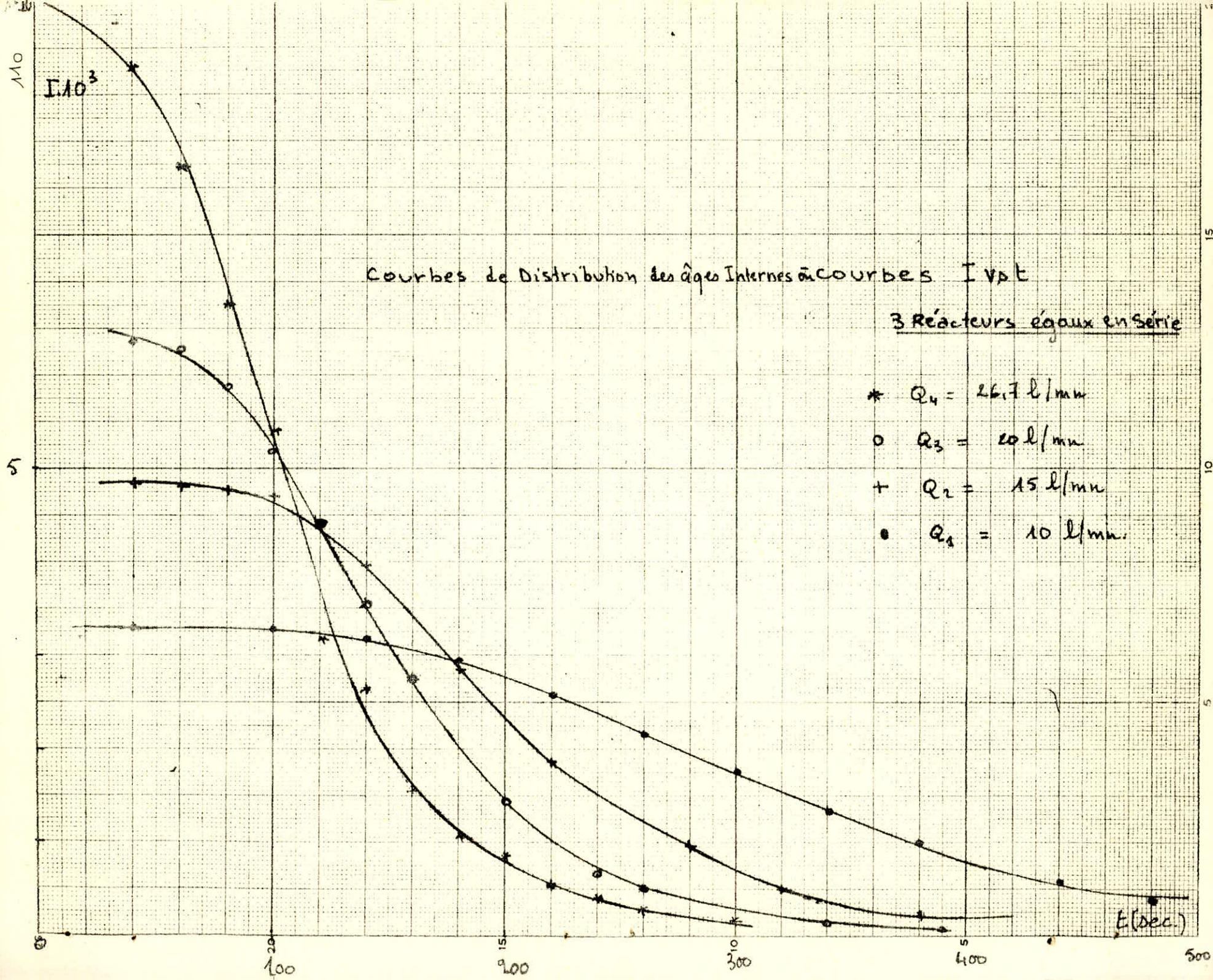
t (sec)

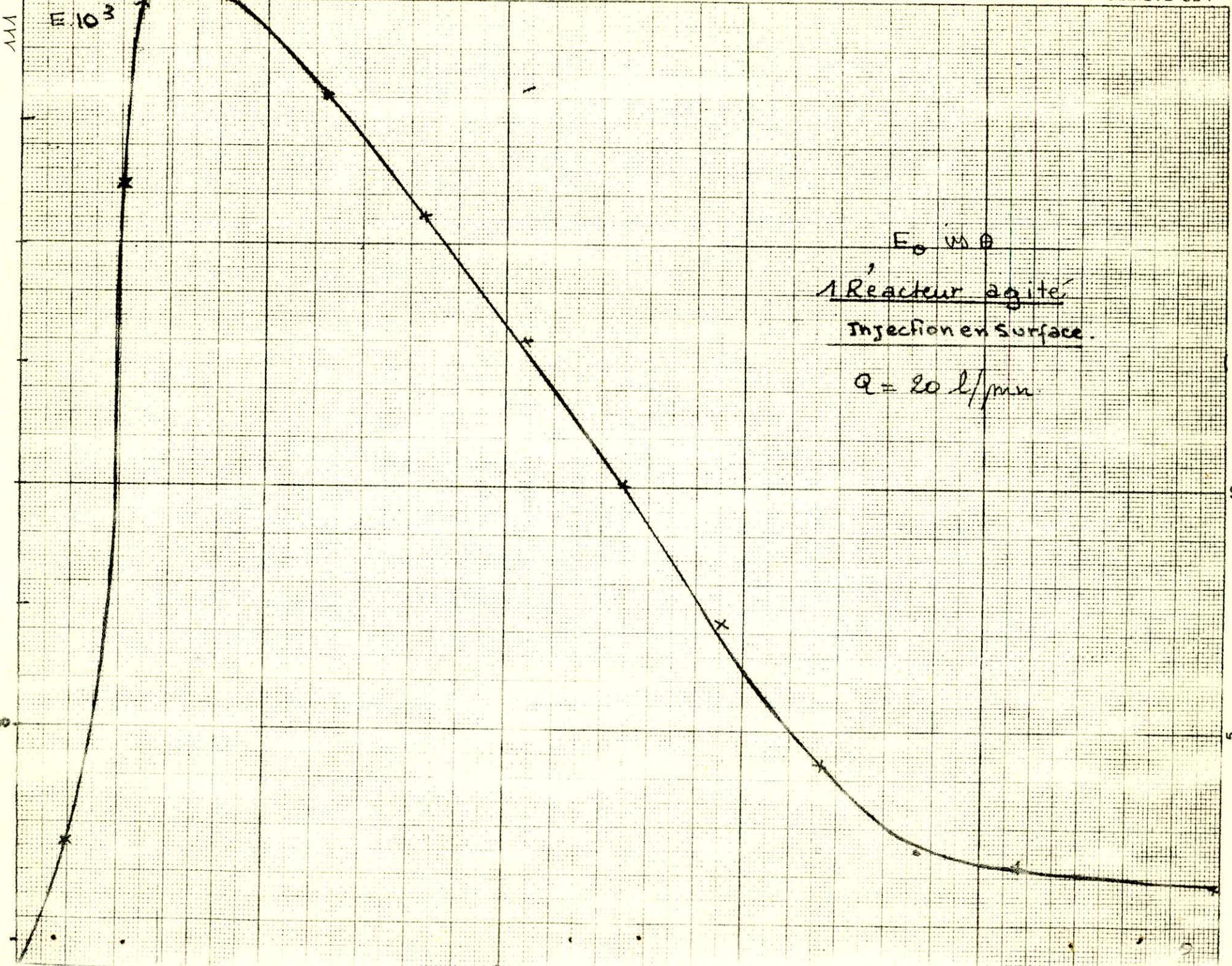


t (A)

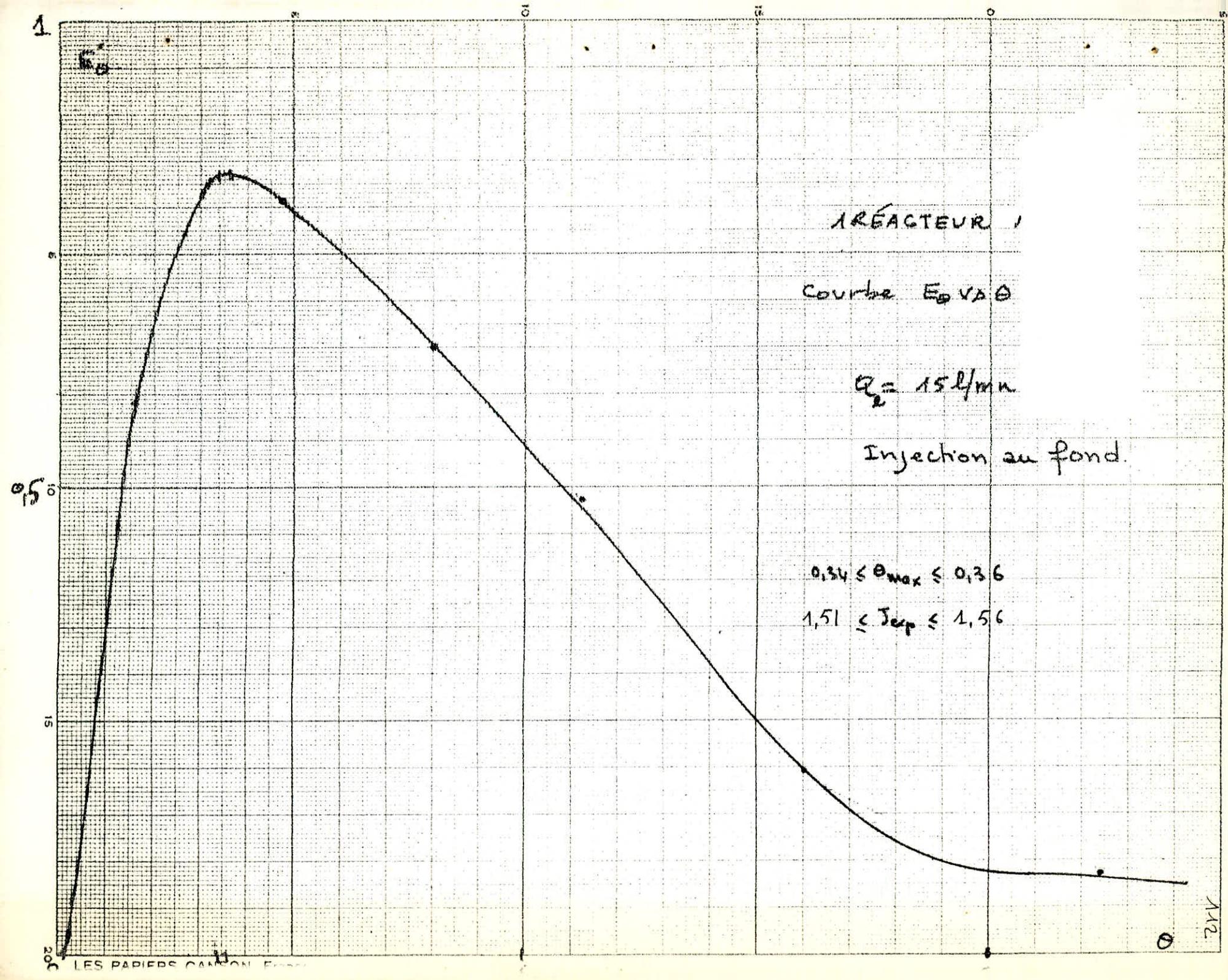
F







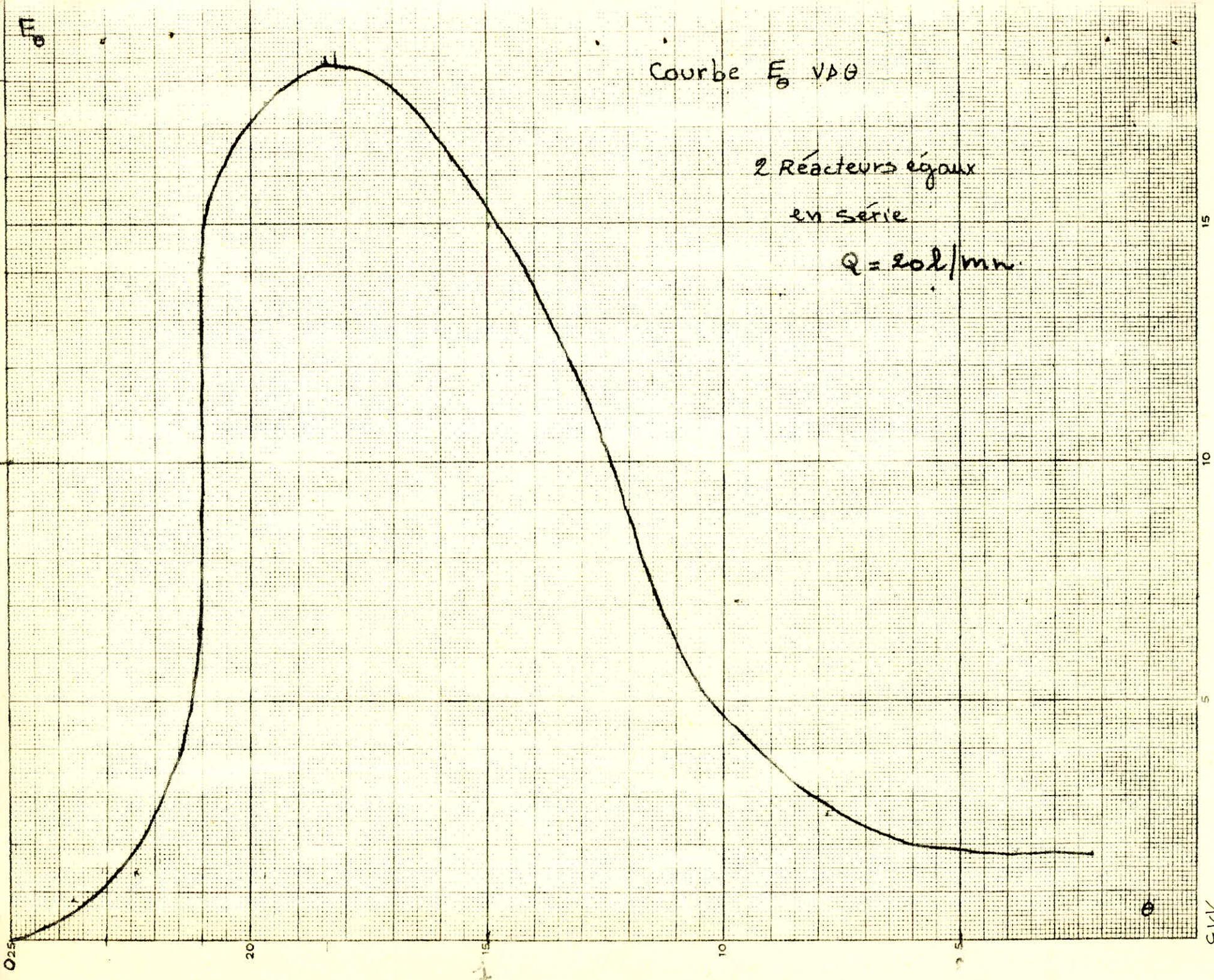
$E_0 \text{ in } \theta$
1 Réacteur agité
Injection en surface.
 $Q = 20 \text{ l/min}$

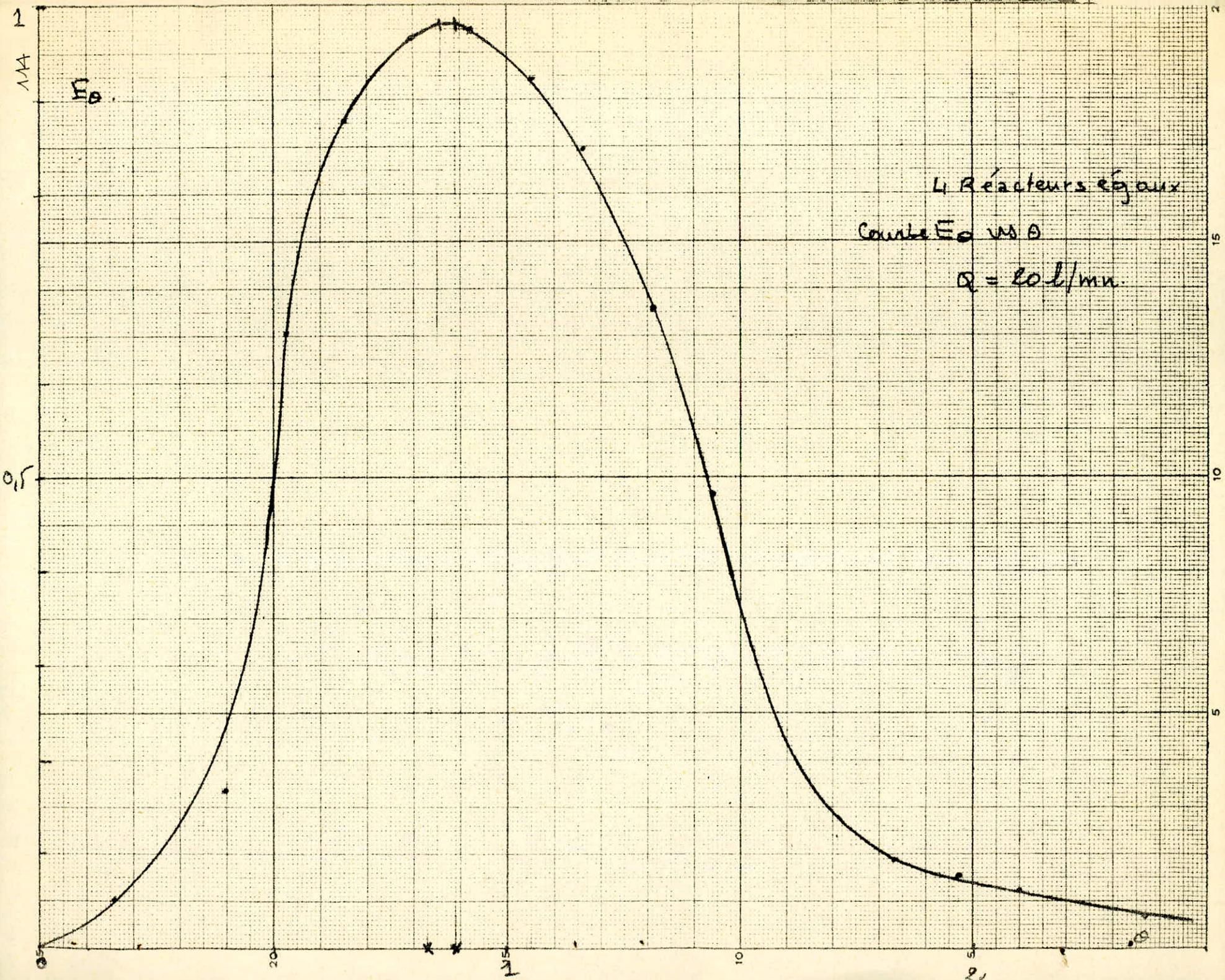


Courbe E_0 VAO

2 Réacteurs égaux
en série

$$Q = 20 \text{ l/mn}$$

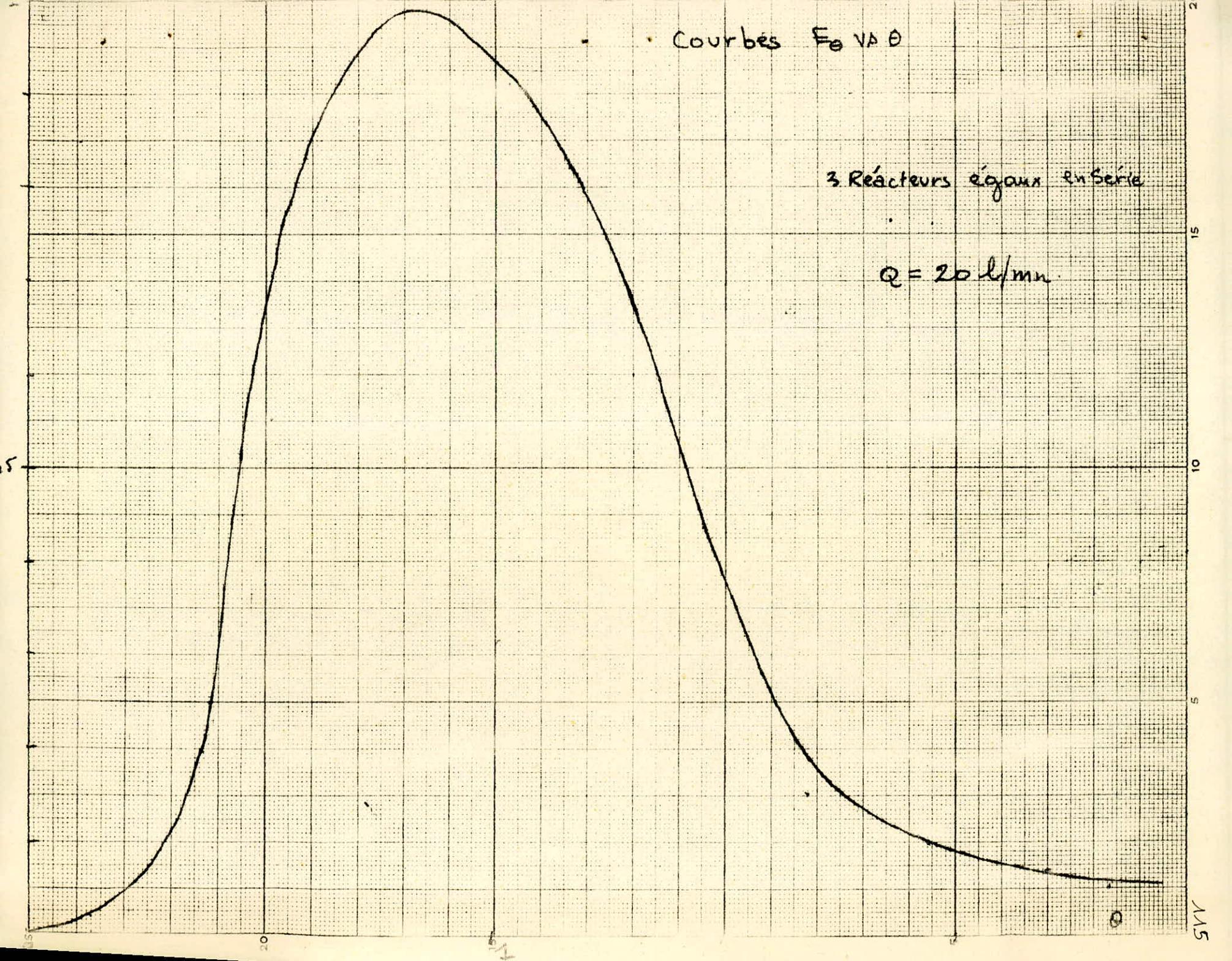


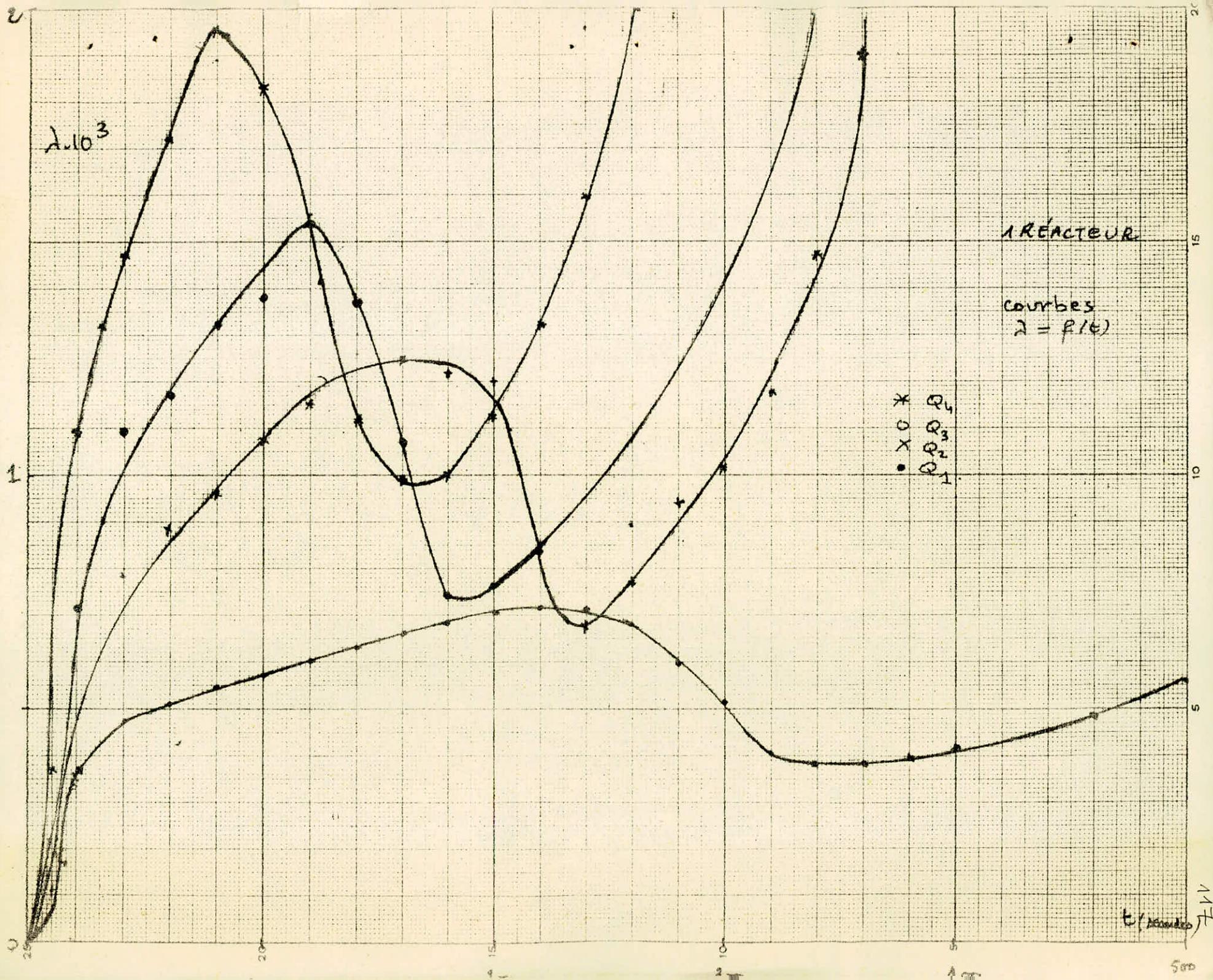


Courbes F_0 VA θ

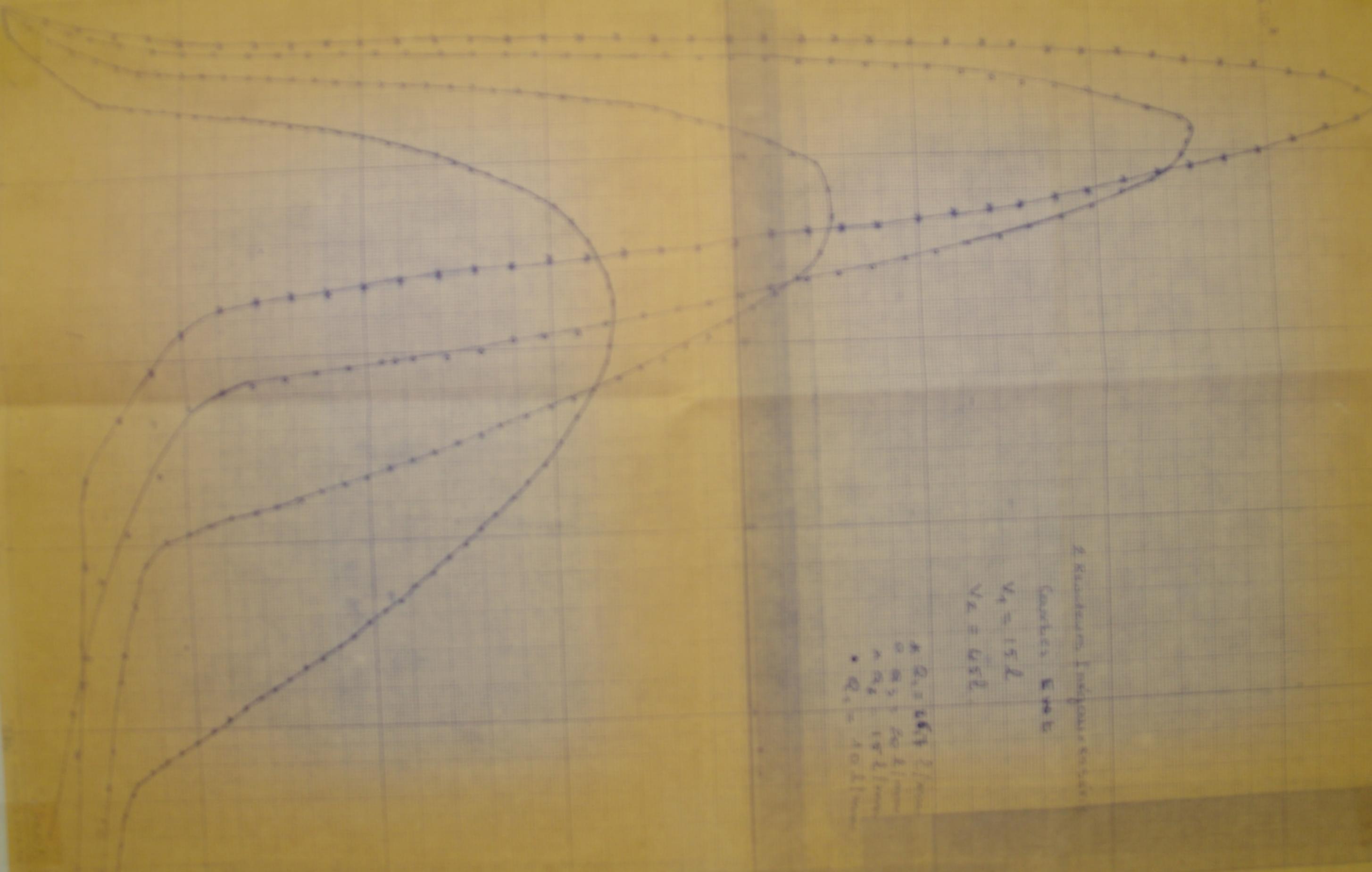
3 Réacteurs égaux en Série

$$Q = 20 \text{ l/min}$$





0.100



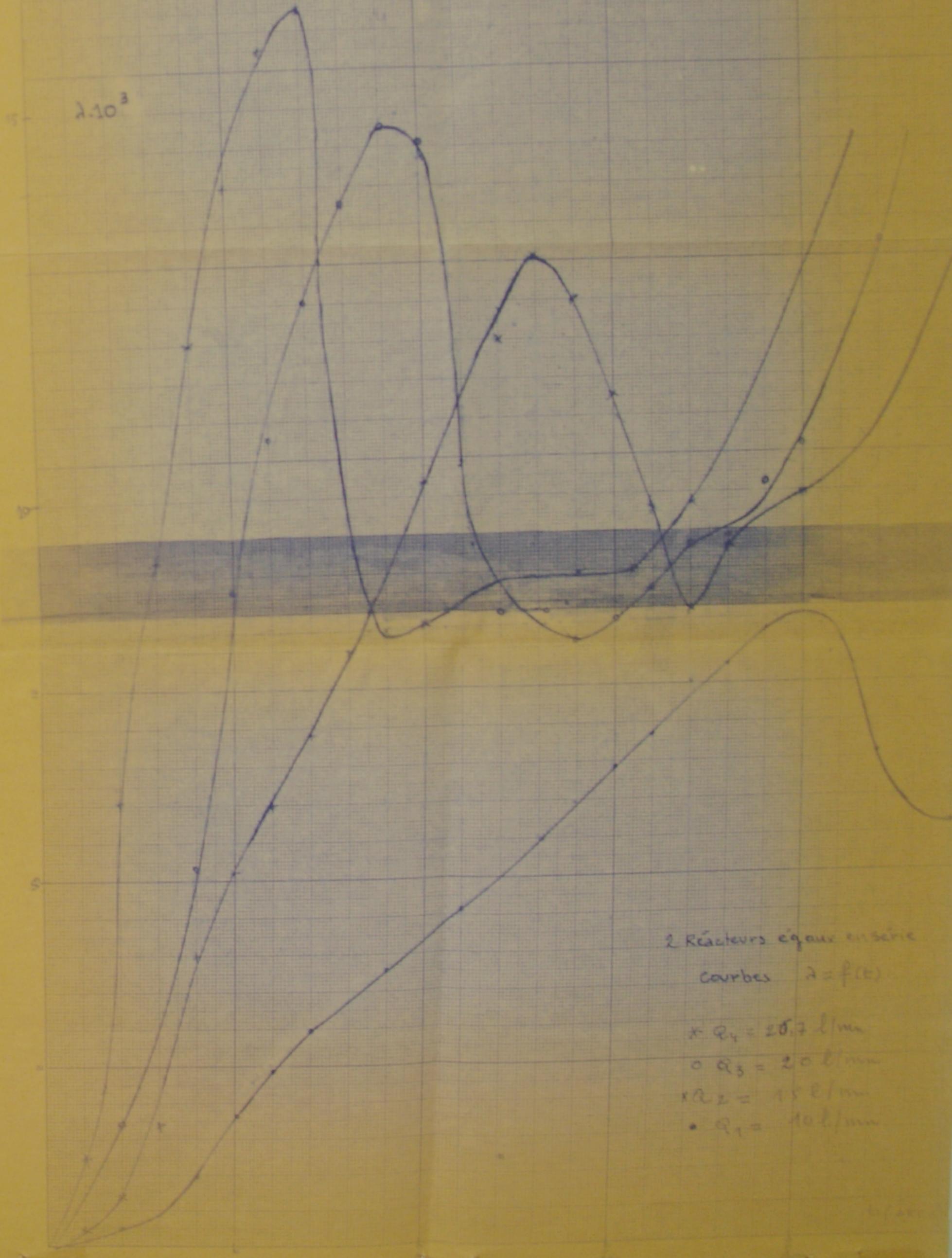
2 Kurven im Induktionsfeld

Geschwindigkeit

$$V_1 = 15 \text{ L}$$

$$V_2 = 15 \text{ L}$$

- $Q_1 = 10 \text{ L/min}$
- $Q_2 = 15 \text{ L/min}$
- $Q_3 = 20 \text{ L/min}$
- $Q_4 = 25 \text{ L/min}$



2 Réacteurs égaux en série
courbes $\lambda = f(t)$

- * $Q_4 = 20.7 \text{ l/min}$
- o $Q_3 = 20 \text{ l/min}$
- x $Q_2 = 15 \text{ l/min}$
- $Q_1 = 10 \text{ l/min}$

3 Réacteurs en série
égaux

Courbes $\lambda = f(t)$

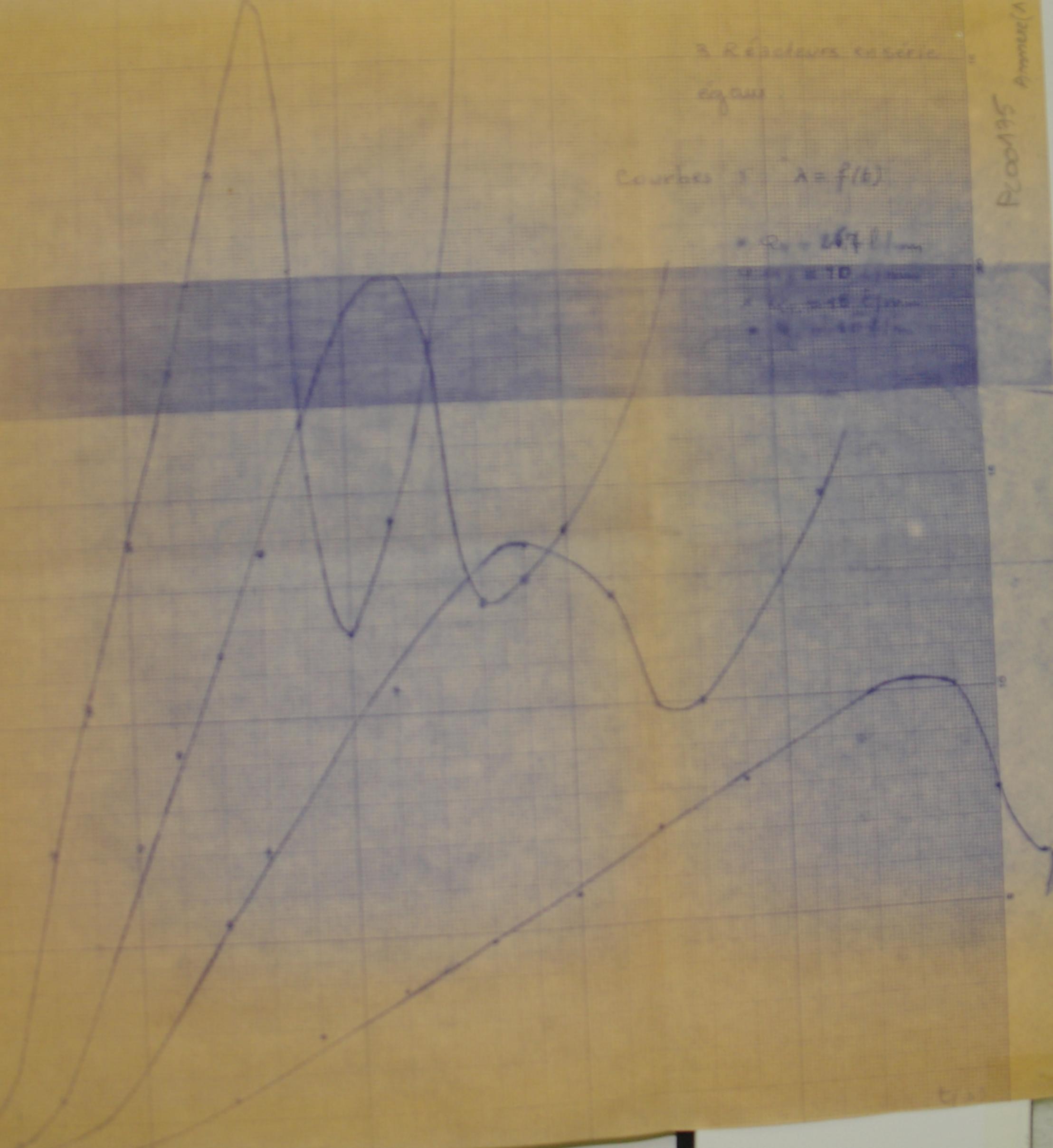
* $Q_0 = 267 \text{ l/min}$

* $V_0 = 10 \text{ l}$

* $V_1 = 10 \text{ l}$

* $V_2 = 10 \text{ l}$

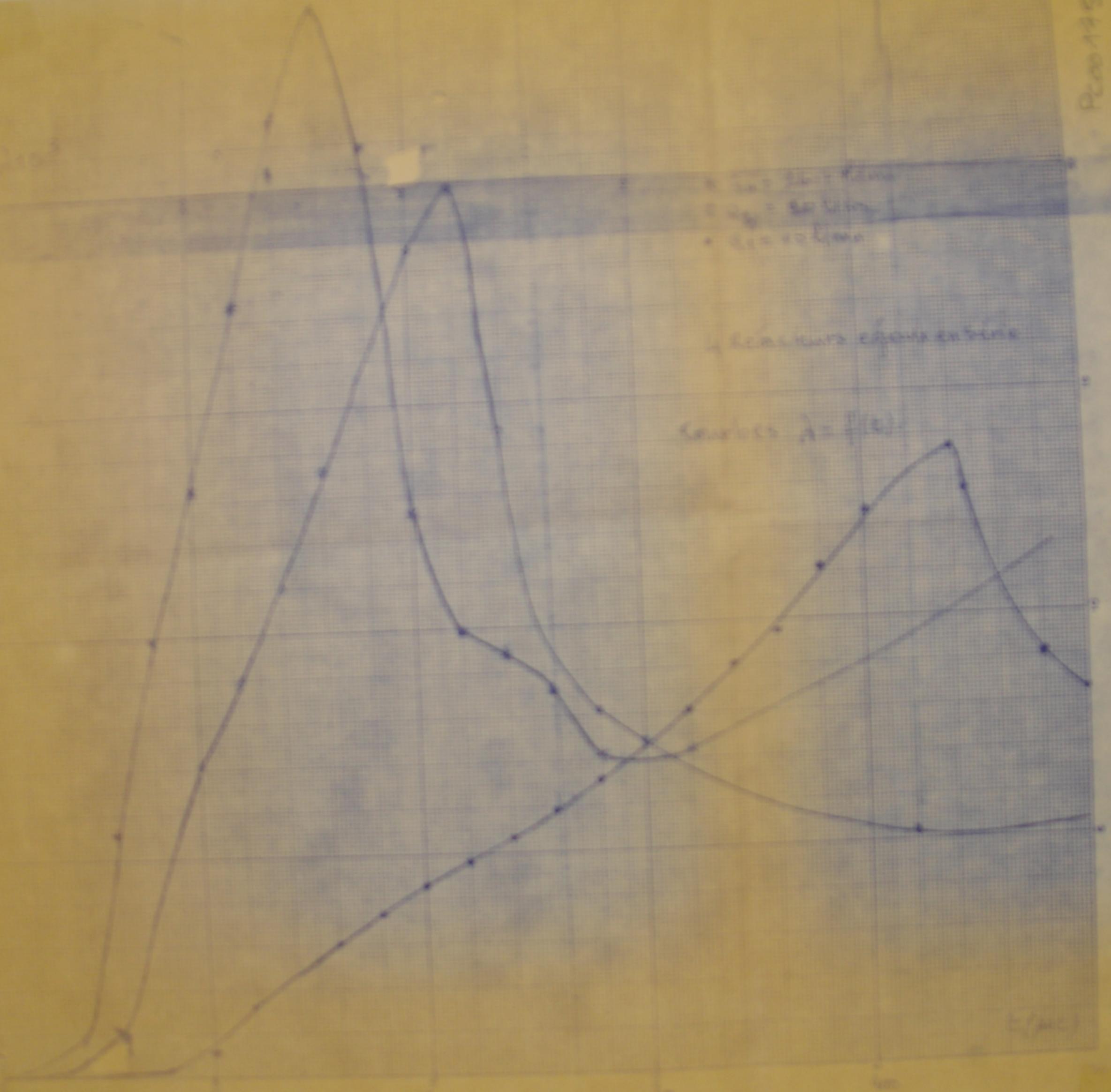
PL00195
Annexe(A)



$\lambda = 20 \text{ cm}$
 $\mu = 1.5$
 $\alpha = 10^\circ$

réacteurs égaux en phase

sources $\Delta z = 10 \text{ cm}$



z (cm)

