

II.1 Méthodologie

Ayant obtenu par la méthode des traceurs une courbe expérimentale de DTS, on se pose en général le problème de rendre compte de l'allure observée au moyen d'un **modèle hydrodynamique simple**, utilisable facilement par la suite pour prédire la conversion et pour servir de base pour l'extrapolation du réacteur. La démarche peut être résumée par les étapes suivantes :

1. Détermination, par la méthode des traceurs, de la courbe expérimentale de DTS du réacteur réel faisant l'objet de la modélisation.

$$\longrightarrow E_{exp.}(t_s)$$

2. Proposer un modèle hydrodynamique (ou modèle d'écoulement) avec son schéma de circulation. Cette étape nécessite une bonne connaissance du fonctionnement du réacteur réel (observation du réacteur).
3. Etablir l'expression de la DTS du modèle hydrodynamique (écriture des bilans de traceur en régime transitoire).

$$\longrightarrow E_{théor.}(t_s, p_i) \quad \text{ou} \quad G(s, p_i) \quad \text{selon le cas}$$

Avec p_i les paramètres du modèle qui sont **à déterminer**

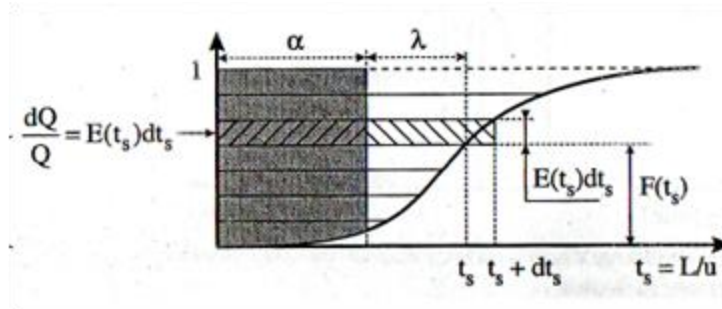
4. Détermination des valeurs des p_i à partir de l'expression des moments en résolvant les équations :

$$(\mu_n)_{exp.} = (\mu_n)_{théor.}(p_i)$$

5. Prédire la conversion de la réaction dans le réacteur (écriture des bilans de réactif dans le modèle en régime permanent et calcul de la conversion).

II.2 Modèle des filets en parallèle

On peut se représenter le fluide en écoulement dans le volume libre V_R avec un débit Q comme formé d'une multitude de filets en écoulement piston caractérisés chacun par un temps de parcours (ou temps de séjour) t_s . Classons par la pensée ces filets par temps de séjour croissant et empilons-les en parallèle de façon que le fluide entre simultanément dans tous les filets et ressort progressivement à des temps croissants de bas en haut. Nous obtenons la figure ci-dessous.



Par définition de la DTS, le filet de temps de séjour compris entre t_s et $t_s + dt_s$ est alimenté par une fraction du débit total Q donnée par :

$$E(t_s) dt_s = \frac{dQ}{Q}$$

De ce fait, le filet de temps de séjour t_s est situé à la « hauteur » normalisée :

$$\frac{\Delta Q}{Q} = \int_0^{t_s} E(t) dt$$

Autrement dit, l'enveloppe des extrémités des filets dessine la courbe $F(t)$. Ce modèle simple permet aussi de visualiser les molécules de fluide *dans* le réacteur et par conséquent de définir leur âge interne, α , espérance de vie, λ , tels que $\alpha + \lambda = t_s$, et les distributions de ces grandeurs. Par exemple, la fraction de volume occupé par du fluide d'âge inférieur à α est le rapport de la surface grisée de la figure précédente à la surface totale comprise entre la courbe F et son asymptote. La distribution des âges internes, $I(t)$, est telle que $I(t)dt$ est la fraction de volume occupé par du fluide d'âge compris entre t et $t + dt$. On a alors :

$$\frac{\int_0^\alpha (1-F) dt}{\int_0^\infty (1-F) dt} = \frac{\int_0^\alpha (1-F) dt}{\bar{t}_s} = \int_0^\alpha I(t) dt \quad \text{ou} \quad I(\alpha) = \frac{1-F(\alpha)}{\bar{t}_s} = \frac{1}{\bar{t}_s} \int_0^\infty E(t_s) dt_s$$

Exemple :

Le modèle des filets en parallèle est une image fidèle de la réalité pour un écoulement laminaire. Établir l'expression de $E(t_s)$ pour un fluide incompressible s'écoulant dans une conduite cylindrique. Si on désirait effectuer une mesure de DTS, quelle difficulté rencontrerait-on pour injecter le traceur ? Que serait la distribution, $E'(t_s)$, si le détecteur était sensible à la *concentration moyenne* dans la section du tube et non au *débit moyen* de traceur ? Calculer les temps de séjour moyen avec E et E' .

II.3 Modélisation du réacteur agité continu réel par association de réacteurs idéaux

Pour tenir compte de certaines caractéristiques de l'écoulement comme :

- Des zones intensément mélangées, bien représentées par un mélangeur idéal ;
- Des recyclages ou des courts-circuits qui peuvent être représentés par les lignes idéales reliant les éléments d'un schéma de circulation ;
- Des zones plus ou moins mortes échangeant de la matière avec d'autres zones participant davantage à l'écoulement.

On est amené à proposer un ou plusieurs modèles obtenus par une association judicieuse de réacteurs idéaux. Le réacteur réel est alors représenté par un schéma de circulation dont les éléments ne sont pas des unités réelles, mais des éléments caractéristiques de l'état hydrodynamique de certaines régions du fluide. Les différents modèles de la figure ci-dessous emploient cette approche pour représenter un réacteur agité continu réel dont la conception pose problème :

- La sortie du fluide s'opère par surverse en l'absence de chicane qui forcerait la sortie du fluide du fond de la cuve.
- Le mobile d'agitation, situé assez haut, n'assure pas de brassage en fond de cuve.

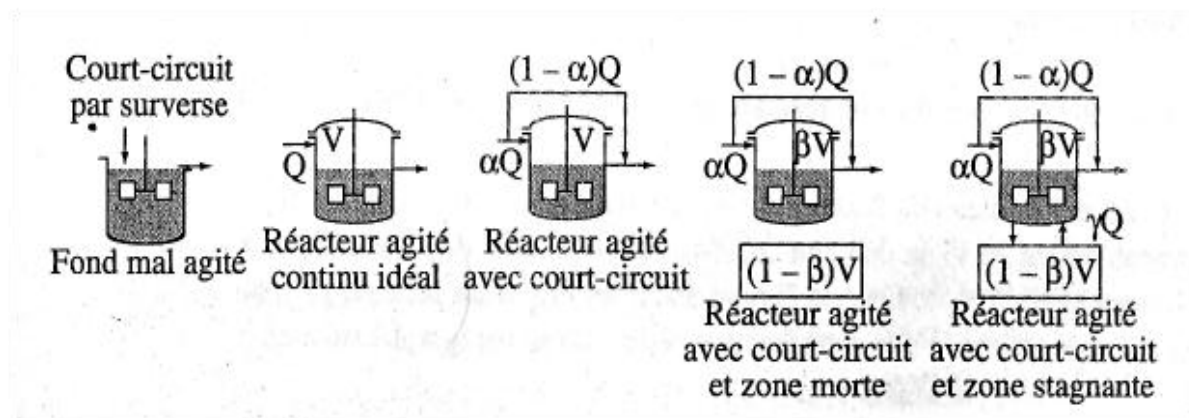


Figure : réacteur agité continu réel (à gauche) et quatre modèles hydrodynamiques

Les quatre modèles représentent l'écoulement de manière plus ou moins détaillée. Outre le « réalisme » du modèle, le niveau de détail se mesure par le nombre de paramètres du modèle inconnus, a priori :

- Le modèle le plus simple consiste à assimiler le réacteur réel à un réacteur agité continu idéal. Il n'y a qu'un paramètre inconnu, $\frac{V}{Q}$, qui s'obtient aisément par une mesure de DTS. C'est toutefois un modèle grossier incapable de rendre compte du court-circuit et du fluide stagnant en fond de cuve.

Chapitre II : Modélisation macroscopique de l'écoulement en réacteur réel

- Le second modèle rend compte du court-circuit mais ignore le fluide stagnant. Il comporte deux paramètres inconnus, α fraction de débit actif, et le temps de séjour moyen dans le mélangeur proprement dit $\frac{V}{\alpha Q}$.
- Le troisième modèle rend compte du court-circuit et d'un volume de fluide inaccessible $(1 - \beta)V$. Toutefois, il ne comporte que deux paramètres inconnus, α et $\frac{\beta V}{\alpha Q}$, temps de séjour moyen dans la zone accessible, hors court-circuit. Ce n'est en fait qu'une variante du modèle précédent.
- Le quatrième modèle est le plus détaillé car il rend compte d'un échange de fluide entre la zone agitée continue idéale et la zone stagnante, Ce modèle comporte quatre paramètres inconnus, α , $\frac{V}{\alpha Q}$, temps de séjour moyen hors court-circuit, β et γQ , débit de recyclage entre les zones.

Au moyen des bilans de matière en régime transitoire et des bilans aux nœuds, il est possible d'accéder à la transformée de Laplace de $E(t)$. Il est ensuite facile d'en déduire l'expression théorique des moments par le théorème de Van der Laan : $\mu_n = (-1)^n \lim_{s \rightarrow 0} \frac{\partial^n G}{\partial s^n}$

Le tableau ci-dessous présente les expressions $G(s)$, $\bar{t}_s$, σ^2 , et éventuellement $E(t)$ en fonction de $\tau = \frac{V}{Q}$, α , β et γ .

$G(s)$	$\bar{t}_s$	σ^2	$E(t)$
$\frac{1}{1 + \tau s}$	τ	τ^2	$\frac{e^{-t/\tau}}{\tau}$
$1 - \alpha + \frac{\alpha}{1 + \frac{\tau s}{\alpha}}$	τ	$\tau^2 \left(\frac{2}{\alpha} - 1 \right)$	$(1 - \alpha)\delta(t) + \frac{\alpha^2}{\tau} e^{-\alpha t/\tau}$
$1 - \alpha + \frac{\alpha}{1 + \frac{\beta \tau s}{\alpha}}$	$\beta \tau$	$\beta^2 \tau^2 \left(\frac{2}{\alpha} - 1 \right)$	$(1 - \alpha)\delta(t) + \frac{\alpha^2}{\beta \tau} e^{-\alpha t/\beta \tau}$
$1 - \alpha + \frac{\alpha^2}{1 + \tau s \frac{1 + \beta(1 - \beta) \frac{\tau s}{\gamma}}{1 + (1 - \beta) \frac{\tau s}{\gamma}}}$	τ	$\tau^2 \left(\frac{2}{\alpha} - 1 + \frac{2(1 - \beta)^2}{\gamma} \right)$	$[-]$

Chapitre II : Modélisation macroscopique de l'écoulement en réacteur réel

Ce tableau appelle les remarques suivantes :

- Plus le modèle est détaillé, plus les paramètres sont nombreux et les expressions analytiques lourdes. L'emploi d'un programme de calcul formel pour le calcul des moments d'ordre supérieur à 1 par le théorème de Van der Laan est particulièrement recommandé.
- Ces modèles étant purement conceptuels, leurs paramètres ne sont pas accessibles par des mesures spécifiques. Seul l'accord entre la DTS théorique et la DTS expérimentale permet de les déterminer par ajustement numérique. Il est alors évident que plus le nombre de paramètres, inconnus, est élevé, plus leur détermination est difficile et *imprécise*.

Les deux derniers modèles sont en principe identiques quand $\gamma = 0$. Toutefois, on constate que les expressions du temps de séjour moyen sont différentes. Ceci résulte du fait que le volume accessible au fluide est βV dans le modèle 3, et V dans le modèle 4, quel que soit γ , sauf 0. Ce type de désaccord entre modèles *dans des cas limites* est fréquent.

II.4 Modélisation du réacteur tubulaire

Ces réacteurs sont généralement proches de l'écoulement piston idéal. Toutefois, les écarts au comportement idéal (mélange entre tranches successives de fluide) et la perte de charge sont deux caractéristiques qui requièrent d'être détailler.

Leurs DTS sont généralement des courbes en cloche d'autant plus étroites que l'écoulement est plus proche du piston idéal. Les deux modèles **écoulement piston avec dispersion** et **cascade de mélangeurs parfaits** sont les plus utilisés pour décrire ce type de DTS.

II.4.1 Le modèle à dispersion axiale (à 1 paramètre)

Dans les modèles dispersifs les plus simples et les plus courants, les variables descriptives du réacteur sont supposées uniformes dans une section droite. L'écart à l'écoulement piston est représenté par un **processus de dispersion** obéissant à la loi de Fick.

Equation de bilan (par rapport au traceur)

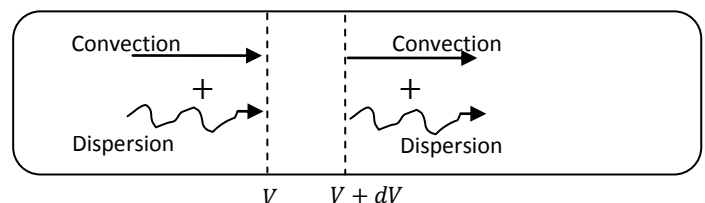
$$D_A \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - \bar{u} \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial C}{\partial t}$$

Sous forme adimensionnelle : $X = \frac{z}{L}$,

$$C^* = \frac{C}{C_0} , \quad \theta = \frac{t}{\tau}$$

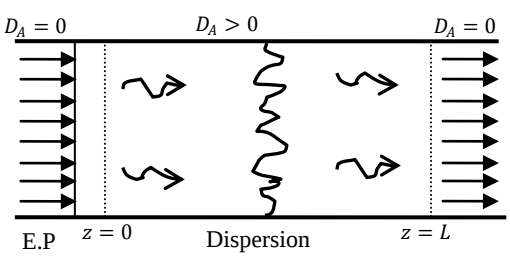
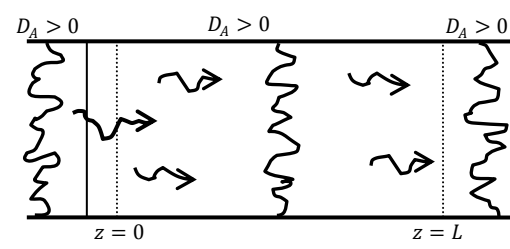
$$\frac{\partial^2 C^*}{\partial X^2} - P \frac{\partial C^*}{\partial X} = P \frac{\partial C^*}{\partial \theta} \quad \text{avec} \quad P = \frac{\bar{u}L}{D_A} : \text{le critère de Peclet}$$

La solution $C^*(X, \theta)$ dépend des conditions aux limites (3 types de conditions aux limites).



Chapitre II : Modélisation macroscopique de l'écoulement en réacteur réel

Le tableau ci-dessous résume les expressions de μ_1 et σ^2 de $E(\theta) = C^*(1, \theta)$ résultat de l'intégration.

Type de conditions aux limites	$\bar{t}_s$	σ^2
 <i>Fermé à la dispersion</i>	τ	$\tau^2 \left[\frac{2}{P} - \frac{2}{P^2} (1 - e^{-P}) \right]$
 <i>Ouvert à la dispersion</i>	$\left(1 + \frac{2}{P} \right) \tau$	$\tau^2 \left(\frac{2}{P} + \frac{8}{P^2} \right)$
<i>Semi ouvert à la dispersion en amont</i> <i>Semi ouvert à la dispersion en aval</i>	$\left(1 + \frac{1}{P} \right) \tau$	$\tau^2 \left(\frac{2}{P} + \frac{3}{P^2} \right)$

Remarques importantes :

- lorsque l'écart à l'écoulement piston est faible ($P > 100$), les DTS correspondant aux différentes conditions sont quasiment indiscernables (identiques). La DTS s'approche beaucoup d'une gaussienne :

$$E(t_s, P) = \frac{1}{2\tau} \sqrt{\frac{P}{\pi}} \cdot \exp \left[-\frac{P(\tau - t_s)^2}{4\tau^2} \right]$$

DTS du modèle à dispersion axiale faible. Le paramètre du modèle est le nombre de Peclet, P

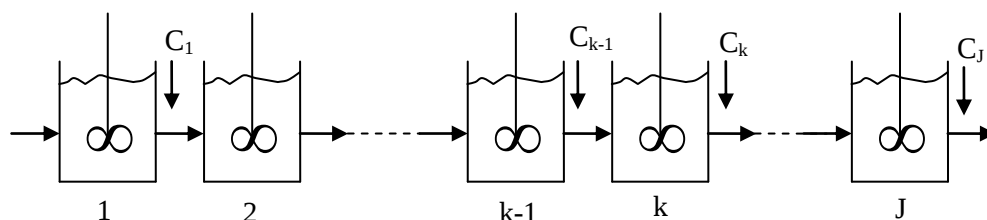
$$E(\theta, P) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{P}{\pi}} \cdot \exp \left[-\frac{P(1-\theta)^2}{4} \right]$$

DTS réduite du modèle.

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

2- lorsque P est nettement inférieur à 100 (P de l'ordre de 10), les conditions aux limites commencent à intervenir fortement et il faut se reporter aux expressions exactes. Mais l'utilisation du modèle à dispersion n'est pas toujours justifiée physiquement aux très faibles valeurs de P .

II.4.2 Le modèle des mélangeurs en cascades (à 1 paramètre)



Méthode des moments

Le bilan transitoire de traceur dans un mélangeur de rang k de la cascade s'écrit :

$$Q C_{k-1} = Q C_k + \frac{V_R}{J} \frac{dC_k}{dt}$$

Ce qui correspond à la fonction de transfert :

$$\frac{\bar{C}_k}{\bar{C}_{k-1}} = g(s) = \frac{1}{(1 + \frac{\tau}{J}s)}$$

De proche en proche, pour toute la cascade :

$$G(s, J) = \left(1 + \frac{\tau}{J}s\right)^{-J}$$

Fonction de transfert du modèle des mélangeurs en cascade.

Le paramètre du modèle est :

J (le nombre de mélangeurs dans la cascade).

μ_1 et σ^2 sont obtenues en utilisant la relation de Van der Laan :

$$\mu_1 = \bar{t}_s = (-1) \lim_{s \rightarrow 0} \frac{\partial G}{\partial s}, \quad \mu_2 = (-1)^2 \lim_{s \rightarrow 0} \frac{\partial^2 G}{\partial s^2},$$

avec $\sigma^2 = \mu_2 - \mu_1^2$

$$\bar{t}_s = \tau \quad \sigma^2 = \frac{\tau^2}{J}$$

Chapitre II : Modélisation macroscopique de l'écoulement en réacteur réel

Remarque :

L'inverse de $G(s)$ (l'original dans le domaine du temps réel) est la DTS. C'est une distribution Gamma (ou de Poisson) :

$$E(t_s, J) = \left(\frac{J}{\tau}\right)^J \cdot \frac{t_s^{J-1}}{(J-1)!} \cdot \exp\left(-\frac{J}{\tau} t_s\right)$$

DTS du modèle des mélangeurs en cascade.

Le paramètre du modèle est :

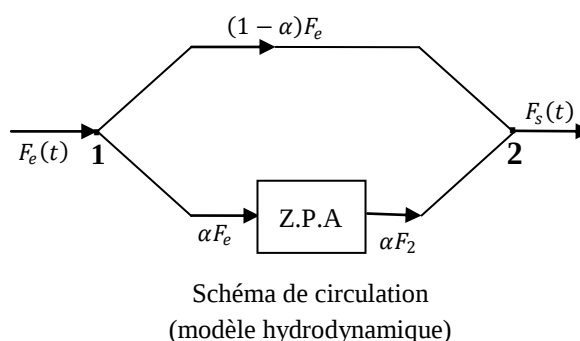
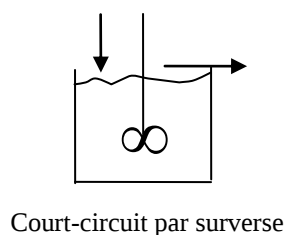
***J** (le nombre de mélangeurs dans la cascade).*

Annexe

A. 1 Modélisation du réacteur agité continu réel

1. Modèle à un paramètre

Exemple : Réacteur agité avec court-circuit



Méthode des moments

$G(s)$ du modèle hydrodynamique ?

$$G(s) = \frac{\bar{F}_s}{\bar{F}_e} \quad \bar{F}_s : \text{la T.L de } F_s, \quad \bar{F}_e : \text{la T.L de } F_e$$

$$F_s(t) = ? \quad \text{bilan au nœud 2 : } (1 - \alpha)F_e + \alpha F_2 = F_s \quad \text{sa T.L est : } (1 - \alpha)\bar{F}_e + \alpha \bar{F}_2 = \bar{F}_s$$

$$G(s) = \frac{(1 - \alpha)\bar{F}_e + \alpha \bar{F}_2}{\bar{F}_e}, \quad G(s) = (1 - \alpha) + \alpha \frac{\bar{F}_2}{\bar{F}_e}$$

avec $\frac{\bar{F}_2}{\bar{F}_e} = G_1(s)$? la fonction de transfert de la Z.P.A

bilan de matière dans la Z.P.A :

$$\alpha F_e = \alpha F_2 + \frac{d}{dt}(C_2 V) \quad , \quad \alpha F_e = \alpha F_2 + V \frac{d}{dt} \left(\frac{\alpha F_2}{\alpha Q} \right) \quad , \quad \alpha F_e = \alpha F_2 + \alpha \frac{V}{\alpha Q} \frac{dF_2}{dt}$$

sa T.L est :

$$\alpha \bar{F}_e = \alpha \bar{F}_2 + \alpha \frac{\tau}{\alpha} [s \bar{F}_2 + \underbrace{F_2(t=0)}_0] \quad , \quad \alpha \bar{F}_e = \alpha \bar{F}_2 \left(1 + \frac{\tau s}{\alpha} \right) \quad , \quad \frac{\alpha \bar{F}_2}{\alpha \bar{F}_e} = \frac{1}{1 + \frac{\tau s}{\alpha}} = G_1(s)$$

Enfin :

$$G(s, \alpha) = (1 - \alpha) + \frac{\alpha}{1 + \frac{\tau s}{\alpha}}$$

Fonction de transfert du R.A avec court-circuit.

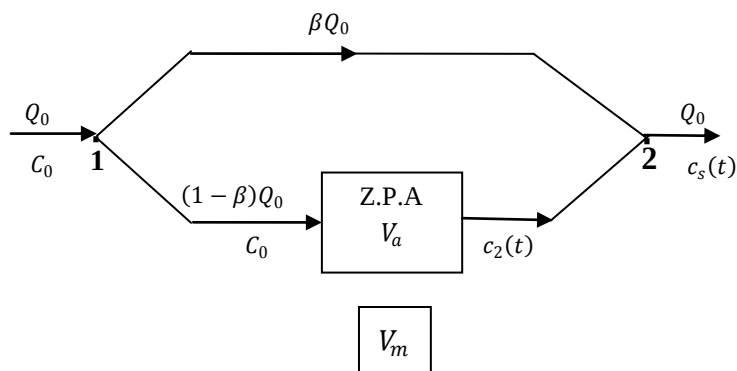
Le paramètre du modèle est α , la fraction du débit dans la Z.P.A.

$$\mu_1 = (-1) \lim_{s \rightarrow 0} \frac{\partial G}{\partial s} \quad , \quad \mu_2 = (-1)^2 \lim_{s \rightarrow 0} \frac{\partial^2 G}{\partial s^2}$$

$$\bar{t}_s = \tau \quad , \quad \sigma^2 = \tau^2 \left(\frac{2}{\alpha} - 1 \right)$$

2. Modèle à 2 paramètres

Exemple : Réacteur agité avec court-circuit et volume mort



Le bilan de traceur dans la Z.P.A, à un instant t après l'injection donne :

$$C_0 = c_2 + \frac{\alpha}{1-\beta} \tau \frac{dc_2}{dt} \quad \text{après intégration : } \frac{c_2}{C_0} = 1 - \exp \left[-\frac{1-\beta}{\alpha} \left(\frac{t}{\tau} \right) \right] \quad (1)$$

$c_2 = f(c_s)$? le bilan au nœud 2 : $c_2 = \frac{c_s}{1-\beta} - \frac{\beta}{1-\beta} C_0$, dans (1) : $\frac{C_0 - c_s}{C_0} = (1-\beta) \exp \left[-\frac{1-\beta}{\alpha} \left(\frac{t}{\tau} \right) \right]$ ou encore $\frac{C_0}{C_0 - c_s} = \frac{1}{(1-\beta)} \exp \left[\frac{1-\beta}{\alpha} \left(\frac{t}{\tau} \right) \right]$ les deux paramètres du modèle sont β et α (à déterminer)

Reste à calculer les valeurs de α et β qui sont celles du modèle, à condition que celui-ci représente convenablement le réacteur réel. Pour vérifier ceci, il faut confronter les résultats expérimentaux aux résultats du modèle et déterminer par la même les paramètres α et β ; graphiquement on trace $\ln \left[\frac{C_0}{C_0 - c_s} \right]_{exp} = f(t)$, si le modèle représente bien le réacteur réel, on doit obtenir une droite. La pente et l'ordonnée à l'origine permettent la détermination de α et β .

3. Modèle à 3 paramètres

Exemple : Réacteur agité avec court-circuit et volume stagnant échangeant de la matière avec la Z.P.A

