

I.A.3) Unité industrielle de synthèse de l'éthanolamine

La synthèse de l'éthanolamine est effectuée sous une pression totale de 70 bars dans un réacteur continu dans lequel le mélange est un liquide homogène (figure 3). Les températures et débits d'entrée et de sortie sont précisés dans le tableau 1.

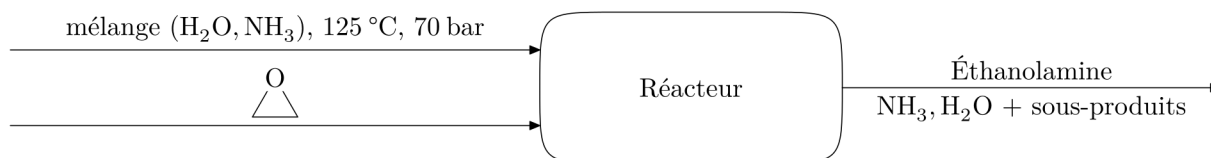


Figure 3

La température d'ébullition de l'eau sous une pression de 70 bar vaut 285 °C. L'enthalpie standard de vaporisation de $\text{NH}_3(1)$ vaut, à 298 K, 20 $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$.

Q 8. Préciser l'équation de réaction modélisant la transformation chimique ayant lieu dans le réacteur. Déterminer si la transformation mise en jeu dans le réacteur est totale ou non.

	Entrée	Sortie
Température (°C)	125	—
Débit massique ($\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$)	20 000	20 000
Débit en quantité de matière en NH_3 ($\text{kmol}\cdot\text{h}^{-1}$)	790	690
Débit en quantité de matière en H_2O ($\text{kmol}\cdot\text{h}^{-1}$)	140	140
Débit en quantité de matière en oxyde éthylène ($\text{kmol}\cdot\text{h}^{-1}$)	100	≈ 0
Débit en quantité de matière en éthanolamine ($\text{kmol}\cdot\text{h}^{-1}$)	0	≈ 100

Tableau 1 Caractéristique du réacteur [7]

On peut, en première approximation, considérer la capacité thermique moyenne du mélange constante égale à $C_{\text{moy}} \approx 5 \text{ kJ}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{kg}^{-1}$. L'évolution du système au sein du réacteur est adiabatique et le régime est permanent. L'enthalpie standard de réaction est $-55 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$.

Q 9. Déterminer la valeur de la température de sortie du réacteur. Commenter.

« The objective of this project is to design the most efficient and most versatile¹ system of reactors for a plant converting ammonia and ethylene oxide into ethanolamines. The three ethanolamines produced in this process are monoethanolamine (MEA), diethanolamine (DEA), and triethanolamine (TEA). Of these three products, MEA generally produces the highest profit margin. The reactions that take place are all very fast. Thus, the reactor size does not need to be very big. This system features one stainless steel² plug flow reactor³, three meters long and thirty centimeters in diameter, to give the most efficient reaction for the space in the reactor. We have to ensure that all of the ethylene oxide reacted. Any ethylene oxide left in the system after the reaction would react with something else downstream and increase corrosion and cause pressure differentials in the downstream processes that would be very damaging to that equipment. In general, the residence time⁴ of this reactor, based on a goal of 100 million pounds of ethanolamines per year, will be about thirty seconds. If only MEA is desired, the residence time can be reduced since MEA forms most quickly of all the potential products. This could also allow for more ammonia to flow through the reactor, increasing the ammonia/ethylene oxide ratio and thus the percentage of MEA formed. » (d'après [7]).

¹ versatile : polyvalent.

² stainless steel : acier inoxydable.

³ plug flow reactor : réacteur à écoulement piston.

⁴ residence time : temps de passage.

Q 10. Identifier si le procédé de synthèse de l'éthanolamine est un procédé continu ou discontinu et nommer le type de modélisation du réacteur utilisé et les raisons de ce choix.

Pour comparer l'efficacité de deux modèles de réacteurs, un réacteur modélisé en écoulement piston et un réacteur modélisé parfaitement agité (RPAC), le taux de conversion de l'oxyde d'éthylène est déterminé en fonction du temps de passage x . Le taux de conversion est noté $f(x)$ pour le modèle RPAC et $g(x)$ pour le modèle piston.

Les hypothèses suivantes sont supposées vérifiées pour chaque réacteur :

- la réaction est d'ordre apparent 1 par rapport à l'époxyde ;
- la température est constante dans chacun des réacteurs ;
- à cette température, la constante de vitesse apparente est égale à $k = 2 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$.

Q 11. Établir les expressions des taux de conversion de l'oxyde d'éthylène en fonction de la constante de vitesse apparente k et du temps de passage x , dans les deux modèles de réacteur. Écrire alors les deux fonctions Python `f` et `g` d'entête

```
def f(x:float, k:float) -> float:
def g(x:float, k:float) -> float:
```

qui calculent le taux de conversion de l'oxyde d'éthylène pour le temps de passage x et la constante de vitesse k , respectivement pour un réacteur RPAC et un réacteur en écoulement piston.

En utilisant ces deux fonctions, un programme Python permet de visualiser l'évolution du taux de conversion en fonction du temps de passage pour une constante de vitesse donnée. Le graphe obtenu lors de la mise en œuvre de ce programme est fourni en figure 4.

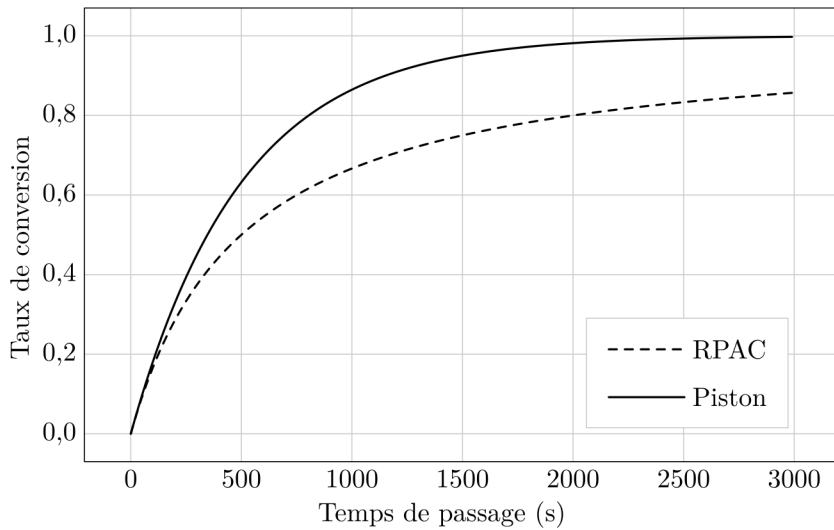


Figure 4 Taux de conversion en oxyde d'éthylène en fonction du temps de passage

Q 12. Comparer l'efficacité des deux modèles de réacteurs.

Enthalpies standard de formation à 298 K

	$\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2(\text{g})$	$\text{O}_2(\text{g})$	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \triangle \\ (\text{g}) \end{array}$
$\Delta_f H^\circ$ (kJ·mol ⁻¹)	50	0	-50