



Université Claude Bernard



Lyon 1

DIPLÔME NATIONAL DE DOCTORAT

(Arrêté du 25 mai 2016)

Date de la soutenance : **17 février 2023**

Nom de famille et prénom de l'auteur : **Madame KULAJANPENG Kusuma**

Titre de la thèse : « *Modélisation multi-échelle d'un réacteur circulant multizone pour la (co)polymérisation du propylène en phase gazeuse* »

Résumé



Les catalyseurs et les procédés de polymérisation ont évolué au fil des années. Ces développements significatifs ont permis aux producteurs d'élargir la gamme des microstructures de polymères et la productivité des procédés, permettant ainsi d'offrir une large gamme de propriétés d'utilisation finale à un coût raisonnablement bas. Cependant, ces avantages en matière de performance de catalyseurs et de fonctionnement des réacteurs exigent que nous comprenions et maîtrisions le fonctionnement des réacteurs au sens large. En plus de l'étude expérimentale fondamentale de la chimie des polymères, cela signifie que l'on doit développer des modèles de procédés complets et robustes pour améliorer leur compréhension.

Dans cette thèse, un modèle multi-échelle de la (co)polymérisation du propylène en phase gazeuse sur un catalyseur Ziegler-Natta (ZN) dans un réacteur circulant multizone (MZCR) a été développé et validé avec la littérature disponible. En parallèle, des expériences de sorption avec un ou deux composants gazeux ont été réalisées à l'aide d'une méthode de décroissance de pression, dans une cuve équipée d'une micro-chromatographie en phase gazeuse (micro GC). Ces expériences ont permis de générer des données de

solubilité binaire et ternaire dans des conditions industrielles pertinentes, et ainsi d'obtenir un modèle thermodynamique fiable à utiliser dans un modèle de procédé plus réaliste. Le modèle MZCR proposé comprend une modélisation cinétique complète, une modélisation thermodynamique (prenant en compte les mélanges binaires non idéaux et les effets des co-solvants et des anti-solvants) et un modèle de réacteur distribué (bilans globaux de matière et de quantité de mouvement, distribution de la taille des particules (PSD) et distribution du temps de séjour des particules (RTD)). En outre, la reconstruction de la distribution cumulative de la masse molaire (MWD) et de la distribution de la composition chimique (CCD) produites dans le MZCR sur un catalyseur ZN mono-site a été réalisée. Enfin, le modèle MZCR a été utilisé pour décrire le comportement d'un MZCR à l'échelle commerciale basé sur des données de brevet, et pour effectuer une analyse de sensibilité des paramètres importants du processus sur la performance du MZCR et les propriétés du produit.

Le modèle MZCR en régime permanent proposé est basé sur les principes fondamentaux de l'ingénierie de la réaction des polymères. Nous pensons que cet outil de modélisation aidera les ingénieurs et les chimistes à améliorer la productivité, à contrôler la structure et les propriétés des polymères, voire même à créer de nouvelles catégories de polymères.

Mots-clés : Polypropylène, réacteur circulant multizone, modélisation multi-échelle, modélisation cinétique, modélisation thermodynamique, modélisation du réacteur, simulation à l'échelle commerciale, solubilité de plusieurs composantes, effet de co-solubilité, effet d'anti-solubilité.