

Examen final de CALCUL DES REACTEURS

{Exercice: 01}

1. Déterminer les Bilans thermique et matière d'un réacteur continu à agitation parfaite en régime stationnaire et isotherme.
 - 2) ➤ Donner l'exemple d'une réaction d'ordre 0 et 1?
 - 3) ➤ En général, $v=f([A])$ est plus ou moins complexe, comment peut être déterminée si l'association des réacteurs est en série (réacteurs en cascade)?
 - 4) ➤ Si le flux volumique est non constant ($F \neq F_0$), le problème se pose généralement pour les réacteurs en phase gazeuse dans un système fermé, pourquoi?
 - 5) ➤ Déterminer les facteurs d'influence dans ce cas?
 - 6) ➤ Refaire le traitement si la Phase gazeuse est en écoulement permanent, on prend l'exemple d'une réaction d'ordre 1.

{Exercice: 02}

2. Dans le cas d'un Réacteur continu tubulaire à écoulement piston stationnaire, quelles sont les nouvelles grandeurs à introduire?
 - Déterminer les Bilans thermique et matière dans le cas isothermique, et déduire l'Equation de BENTON.
 - Déterminer les Bilans thermique et matière dans le cas adiabatique.
 - Déterminer les Bilans thermique et matière s'il y a un transfert de chaleur.

Bon chance

Examen final de CALCUL DES REACTEURS

{Exercice: 01}

1. Déterminer les Bilans thermique et matière d'un réacteur continu à agitation parfaite en régime stationnaire et isotherme.
 - Donner l'exemple d'une réaction d'ordre 0 et 1?
 - En général, $v=f([A])$ est plus ou moins complexe, comment peut être déterminée si l'association des réacteurs est en série (réacteurs en cascade)?
 - Si le flux volumique est non constant ($F \neq F_0$), le problème se pose généralement pour les réacteurs en phase gazeuse dans un système fermé, pourquoi?
 - Déterminer les facteurs d'influence dans ce cas?
 - Refaire le traitement si la Phase gazeuse est en écoulement permanent, on prend l'exemple d'une réaction d'ordre 1.

{Exercice: 02}

2. Dans le cas d'un Réacteur continu tubulaire à écoulement piston stationnaire, quelles sont les nouvelles grandeurs à introduire?
 - Déterminer les Bilans thermique et matière dans le cas isothermique, et déduire l'Equation de BENTON.
 - Déterminer les Bilans thermique et matière dans le cas adiabatique.
 - Déterminer les Bilans thermique et matière s'il y a un transfert de chaleur.

Bon chance

Corrige type

Ex01 :

- ① les Bilans thermique et matière d'un réacteur continu à agitation parfaite en régime stationnaire et isotherme:

F : flux volumique (unité de volume/unité de temps) $\frac{1}{8}$

$N_A = F[A]$ (nombre de mole/unité de temps) $\frac{1}{8}$

II.A.1. Bilan thermique

Bilan thermique nul puisque $T = cte$ $\frac{1}{8}$

II.A.2. Bilan de matière

$N_{oA} - N_A = vV$ $\frac{1}{8}$ Il n'y a pas accumulation $\frac{1}{8}$

$F_{oA}[A]_o - F_A[A] = vV$ $\frac{1}{8}$

a- F est constant ($F = F_o$)

Chaque fois qu'on travaille en phase liquide et lorsque la réaction se produit sans variation du volume total (c-à-d, sans variation du nombre de mole totale).

$$[A]_{oA} - [A] = \frac{V}{F} v$$

$\frac{V}{F}$ a la dimension d'un temps, on pose $\delta = \frac{V}{F}$ $\frac{1}{8}$

- Cas général : En général $v = f([A])$ est plus ou moins complexe mais peut être déterminée expérimentalement.

$$v = \frac{1}{\delta} [A]_o - \frac{1}{\delta} [A] = -\frac{1}{\delta} [A] + \frac{1}{\delta} [A]_o$$

- On trace, $v = f([A])$ complexe $\frac{1}{8}$

- On trace sur la même figure la droite $y = -\frac{1}{\delta} [A] + \frac{1}{\delta} [A]_o$ en fonction de $[A]$

L'intersection des deux courbes $\Rightarrow [A]$ (à la sortie du réacteur).

Exemples :

- Réaction d'ordre 0 : $v = k$ $\frac{1}{8}$

$$(1) \rightarrow [A] = [A]_o - k\delta \quad \text{et} \quad \tau = \frac{[A]_o - [A]}{[A]_o} = \frac{k\delta}{[A]_o} \quad \left(\frac{1}{8} \times 2\right)$$

- Réaction d'ordre 1 : $v = k[A]$ $\frac{1}{8}$

$$(1) \rightarrow [A] = \frac{[A]_o}{1 + k\delta} \quad \text{et} \quad \tau = \frac{[A]_o - [A]}{[A]_o} = \frac{k\delta[A]}{(1 + k\delta)[A]} = \frac{k\delta}{(1 + k\delta)} \quad \left(\frac{1}{8} \times 2\right)$$

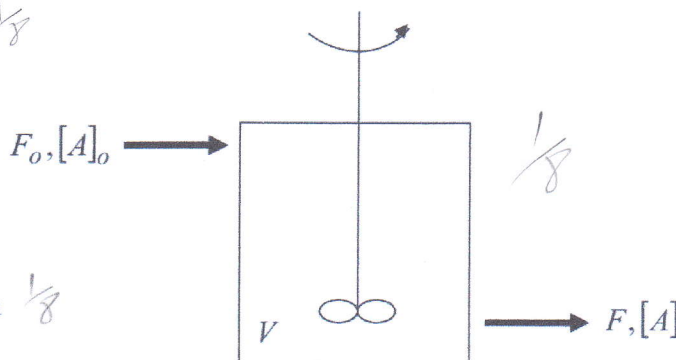
- Cas général : En général $v = f([A])$ est plus ou moins complexe mais peut être déterminée expérimentalement.

$$v = \frac{1}{\delta} [A]_o - \frac{1}{\delta} [A] = -\frac{1}{\delta} [A] + \frac{1}{\delta} [A]_o$$

- On trace, $v = f([A])$ complexe

- On trace sur la même figure la droite $y = -\frac{1}{\delta} [A] + \frac{1}{\delta} [A]_o$ en fonction de $[A]$

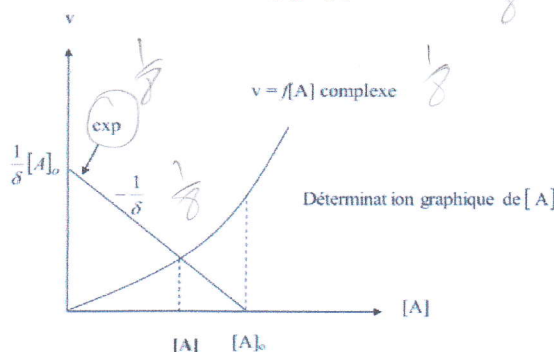
L'intersection des deux courbes $\Rightarrow [A]$ (à la sortie du réacteur).



$\delta = \frac{V}{F}$: s'appelle temps de séjour du réactif A dans le réacteur ou bien temps de passage : C'est le temps mis pour traiter un volume de réactifs égal au volume du réacteur.

$\frac{F}{V}$ (temps⁻¹) s'appelle aussi vitesse spatiale ou débit spécifique de A $\frac{1}{8}$

$$[A]_o - [A] = v\delta \quad (1) \quad \frac{1}{8}$$

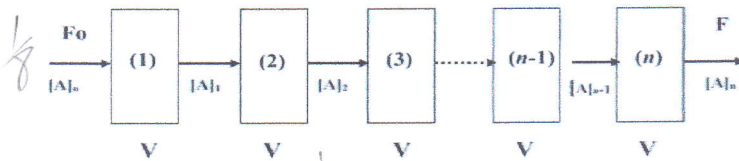


Association de réacteurs en série (réacteurs en cascade)

► **F constant** **V : identique pour tous les réacteurs**

⇒ Résolution algébrique ne donne pas grand chose (concentration à la sortie de chaque réacteur ?).

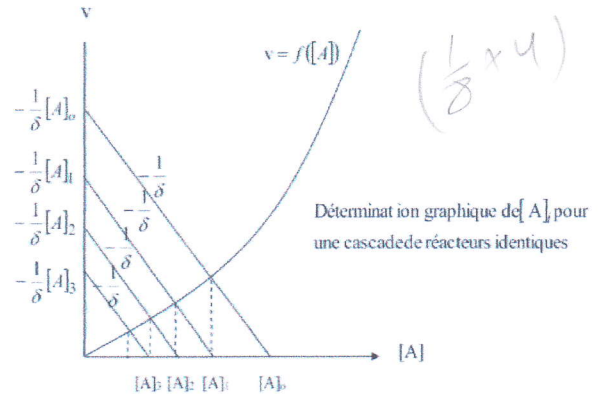
⇒ Résolution graphique :



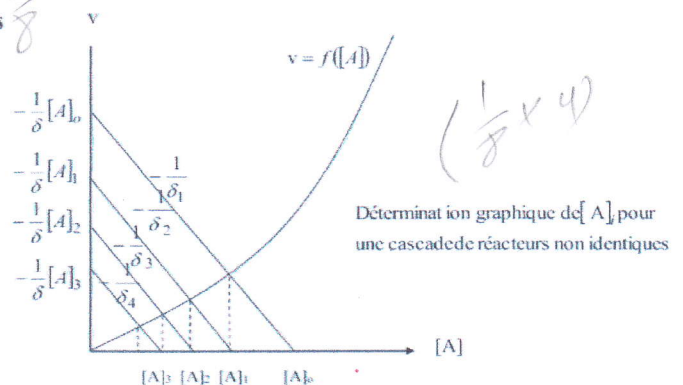
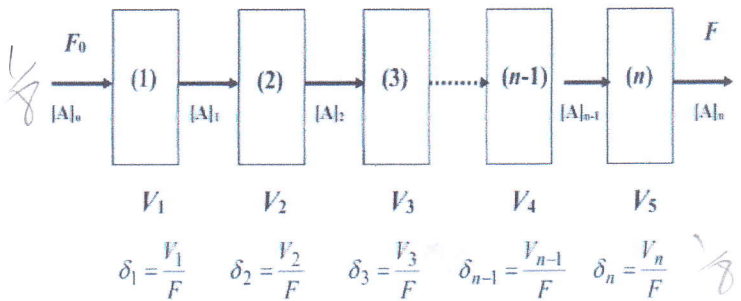
⊠ Résolution algébrique :

$$\begin{aligned} [A]_0 - [A]_1 &= v_1 \delta \rightarrow v_1 = \frac{1}{\delta} [A]_0 - \frac{1}{\delta} [A]_1 \\ [A]_1 - [A]_2 &= v_2 \delta \rightarrow v_2 = \frac{1}{\delta} [A]_1 - \frac{1}{\delta} [A]_2 \\ &\vdots \\ [A]_{n-1} - [A]_n &= v_n \delta \rightarrow v_n = \frac{1}{\delta} [A]_{n-1} - \frac{1}{\delta} [A]_n \end{aligned}$$

$$[A]_0 - [A]_n = \delta \sum_{i=1}^n v_i$$



► **F constant** **V : n'est pas identique pour tous les réacteurs**



$$\begin{aligned} [A]_0 - [A]_1 &= v_1 \delta_1 \rightarrow v_1 = \frac{1}{\delta_1} [A]_0 - \frac{1}{\delta_1} [A]_1 \\ [A]_1 - [A]_2 &= v_2 \delta_2 \rightarrow v_2 = \frac{1}{\delta_2} [A]_1 - \frac{1}{\delta_2} [A]_2 \\ &\vdots \\ [A]_{n-1} - [A]_n &= v_n \delta_n \rightarrow v_n = \frac{1}{\delta_n} [A]_{n-1} - \frac{1}{\delta_n} [A]_n \end{aligned}$$

b- F non constant (F ≠ F0)

Problème se pose généralement pour les réacteurs en phase gaz.

Bilan de matière pour un constituant A du mélange des réactifs.

$$N_o - N_A = vV \Rightarrow F_o [A]_o - F [A] = vV$$

➔ Parce que le contrôle de "P" et "T" sera très difficile pour un gaz dans un système fermé.

➔ ► **Avancement normalize:**

Il est défini par :

$$\chi = \frac{n_j - n_{j,o}}{V_j n_o} \Rightarrow n_j = n_{j,o} + V_j n_o \chi$$

$n_o = \sum_j n_{j,o}$: Nombre total de moles de constituants actifs à l'état initial de la

réaction. D'où :

$$\chi = \frac{\xi}{n_o}$$

• Soit pour une réaction simple, un mélange gazeux parfait comportant n_i moles d'inertes.

* A un instant t donné où la pression est P et la température et T , le volume du gaz est :

$$V = \frac{RT}{P} (n_i + n_o + n_o \chi \sum_j V_j) \\ \sum_j V_j = \Delta v = \sum V_{\text{Produits}} - \sum V_{\text{Réactifs}} \\ \rightarrow V = \frac{RT}{P} (n_i + n_o + n_o \chi \Delta v) \quad (a)$$

* A l'état initial de la réaction, le volume total du mélange est V_o

$$V_o = \frac{RT_o}{P_o} (n_i + n_o) \quad (b)$$

$$I = \frac{n_i}{n_o} : \text{Rapport d'inertie}$$

Le rapport (a) et (b) donne :

$$V = \alpha V_o (1 + \beta \chi) \quad (c)$$

Avec : $\alpha = \frac{P_o T}{P T_o}$: Facteur de dilatation physique

$\beta = \frac{\Delta v}{1 + I}$: Facteur de d'expansion chimique

b.1.2. Phase gazeuse en écoulement permanent

Le volume total V varie sous l'influence des conditions physique (α) et chimiques (β) et de l'avancement de la réaction (χ). Cette variation est d'autant plus grande que la réaction absorbe ou émet des molécules gazeuse et qu'il ya moins d'inertes (β).

Traitement analogue que dans le cas du système fermé $\Rightarrow$

• Pour une réaction simple :

$$F = \alpha F_o (1 + \beta \chi) \quad (\alpha)$$

• Pour une réaction à stœchiométrie multiple :

$$F = \alpha F_o \left(1 + \sum_i \beta_i \chi \right)$$

Avec : $\beta = \frac{\Delta v}{1 + I}$, $I = \frac{N_I}{N_o} = \frac{N_I}{\sum_i N_{i,o}}$, $\alpha = \frac{P_o T}{P T_o}$

Exemple :

* Pour une réaction simple d'ordre 1 :



On suppose que A est introduit pur (un seul constituant) et que P est constante et T est constante.

Exprimons la vitesse de la réaction : $v = k[A] = k[A]_o \frac{1 - \tau}{1 + \beta \tau}$

Bilan de matière :

$$I = \frac{N_I}{N_o} = 0, \quad \alpha = \frac{P_o T}{P T_o} = 1 \quad \beta = \Delta v \quad \text{et} \quad \chi = \tau$$

L'équation (α) devient : $F = F_o (1 + \beta \tau)$

$\rightarrow$ Variation linéaire de F avec τ : $\begin{cases} F \uparrow \text{ Si } \beta > 0 \\ F \downarrow \text{ Si } \beta < 0 \end{cases}$

Le gaz est parfait, d'où le débit molaire total :

$$N_o \tau = N_o - N_A = V v = V k [A]_o \frac{1 - \tau}{1 + \beta \tau}$$

$$N_o = F_o [A]_o \text{ d'où}$$

$$F_o [A]_o \tau = k V [A]_o \frac{1 - \tau}{1 + \beta \tau}$$

$$\frac{V}{F_o} : \text{temps de séjour nominal } \delta$$

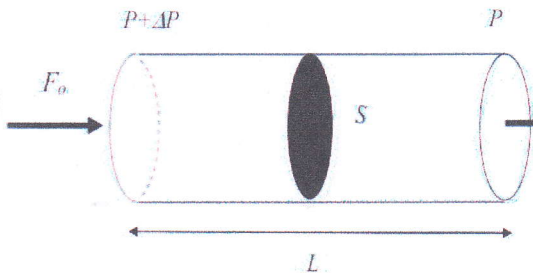
$$k \delta = \frac{\tau (1 + \beta \tau)}{1 - \tau} \quad (3)'$$

$$\beta = 0 \rightarrow k \delta = \frac{\tau}{1 - \tau} \quad (e)$$

EX02:

II. Réacteur continu tubulaire (à écoulement piston)

Supposons un tube cylindrique où circule un fluide (mélange réactionnel)



F, F_o : flux globale du fluide

S : Section du tube traversée par le fluide

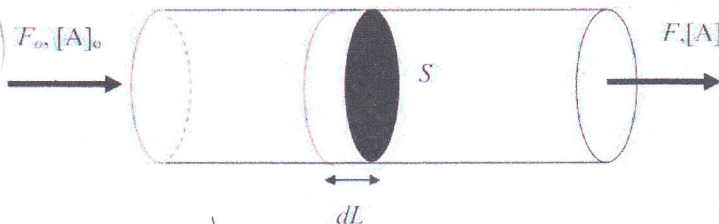
En régime stationnaire, on définit l'écoulement par F et par la vitesse moyenne

de l'écoulement : $u = \frac{\text{Débit volumique}}{\text{Section}} = \frac{V}{S} \Rightarrow F = Su$

Si F est constant $\rightarrow \bar{u} = \text{cst}$

Dans la suite on suppose que $\frac{\Delta L}{L} = 0$ (c-à-d, la perte de charge est nulle)

III.A. Réacteur tubulaire isotherme



III.A.I. Bilan de matière

$$d(N_o - N_A) = d(V) v \Leftrightarrow -dN_A = v dV \quad (1)$$

$$(1) \rightarrow V = \int_{[A]_o}^{[A]} \frac{dN_A}{v} = \int_{[A]_o}^{[A]} \frac{d(F[A])}{v}$$

a-Si F est constant

$$(1) \rightarrow \frac{V}{F} = \int_{[A]_o}^{[A]} \frac{d[A]}{v}$$

$$\rightarrow \delta = \int_{[A]_o}^{[A]} \frac{d[A]}{v} \quad (3)$$

Remarque : (3) est identique à celle d'un réacteur statique : $t = \int_{[A]_o}^{[A]} \frac{d[A]}{v}$

b-Si F non constant

➤ Réaction d'ordre 1 : $v = k[A]$

$$\begin{cases} F = F_o(1 + \beta\tau) \\ [A] = \frac{N_A}{F} = \frac{N_o(1 - \tau)}{F_o(1 + \beta\tau)} = [A]_o \frac{1 - \tau}{1 + \beta\tau} \end{cases}$$

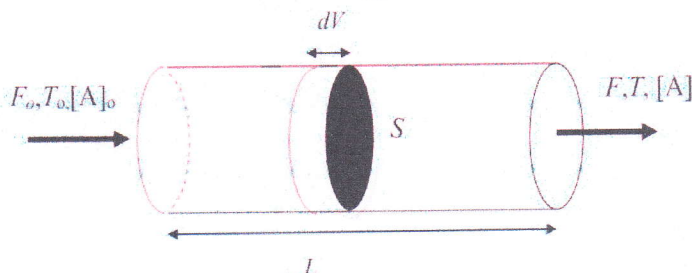
$$\text{Eq (1)} : -dN_A = v dV \rightarrow V = \int_{[A]_o}^{[A]} \frac{dN_A}{v} = \int_0^\tau \frac{N_o d\tau}{k[A]_o \frac{1 - \tau}{1 + \beta\tau}} \text{ car } \begin{cases} N_o - N_A = N_o\tau \Rightarrow -dN_A = N_o d\tau \\ v = k[A] = k[A]_o \frac{1 - \tau}{1 + \beta\tau} \end{cases}$$

$\delta = \frac{V}{F_o} = \frac{1}{F_o} \int_0^\tau \frac{N_o}{k[A]_o} \frac{d\tau}{1-\tau} = \int_0^\tau \frac{1}{k} \frac{1+\beta\tau}{1-\tau} d\tau$ (car, $\frac{N_o}{[A]_o} = F_o$) Intégration : $\rightarrow$ Equation de BENTON :

$k\delta = \frac{V}{F_o} = \int_0^\tau \frac{1+\beta\tau}{1-\tau} d\tau$

$k\delta = (1+\beta) \ln \frac{1}{1-\tau} - \beta\tau$

III.B. Réacteur tubulaire adiabatique



$\begin{cases} \zeta(T - T_o) = QN_o\tau \\ \zeta(T_m - T_o) = QN_o \end{cases}$

$\Rightarrow \frac{\Delta T}{\Delta T_m} = \tau$ (3)

III.B.1. Bilan de matière

$-dN_A = v d(V) \quad (1) \Leftrightarrow N_o d\tau = v dV \quad (1')$

III.B.2. Bilan thermique

$\zeta dT = Qv dV \quad (2)$

$\zeta dT = QN_o d\tau \quad (2')$

Intégration : $\zeta(T - T_o) = QN_o\tau$

Au maximum $T = T_m, \tau = 1$

$\zeta(T_m - T_o) = QN_o = \zeta\Delta T_m$

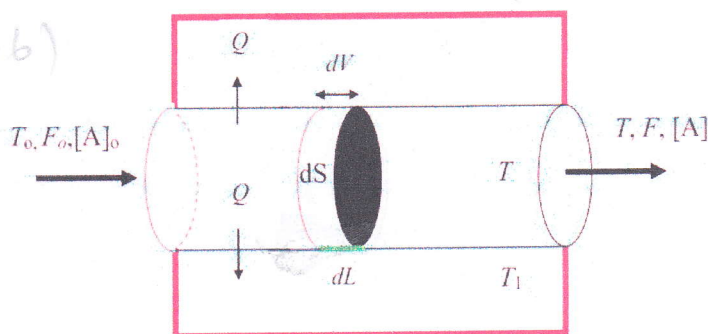
Remarque : Cherchons une relation simple entre τ et T . Pour cela exprimer v à l'aide d'un seul paramètre (T ou τ).

Bilan thermique :

On a : $\frac{\delta}{[A]_o} = \frac{V}{F_o[A]_o} = \frac{V}{N_o} = \int_0^\tau \frac{d\tau}{v} \quad (4)$ (car d'après l'équation (1)' on a $\frac{dV}{N_o} = \frac{d\tau}{v}$)

On voit apparaître toujours le temps de séjour nominal δ .

III.C. Réacteur tubulaire avec transfert de chaleur



(1) $\rightarrow N_o d\tau = v dV = v\pi \frac{D^2}{4} dL \quad (1')$

(2) $\rightarrow QN_o d\tau = \zeta dT + K(T - T_o)\pi D dL \quad (2')$

(1)' $\rightarrow dL = \frac{N_o d\tau}{v\pi \frac{D^2}{4}}$

III.C.1. $T_o = T_1$

III.C.1. a. Bilan de matière

$-dN_A = v dV \rightarrow N_o d\tau = v dV$

(1) (2)' $\rightarrow QN_o d\tau = \zeta dT + K(T - T_o)\pi D \frac{N_o d\tau}{v\pi \frac{D^2}{4}}$

III.C.1. b. Bilan thermique

$-Qv dV + \zeta dT = -K(T - T_o)dS$

$\zeta dT + K(T - T_o)dS = Qv dV = QN_o d\tau \quad (2)$

$\Rightarrow dT = \frac{QN_o d\tau}{\zeta} - K(T - T_o)\pi D \frac{N_o d\tau}{\zeta(v\pi \frac{D^2}{4})}$

$\Rightarrow \frac{dT}{d\tau} = \frac{QN_o}{\zeta} - \frac{4K(T - T_o)N_o}{\zeta D}$