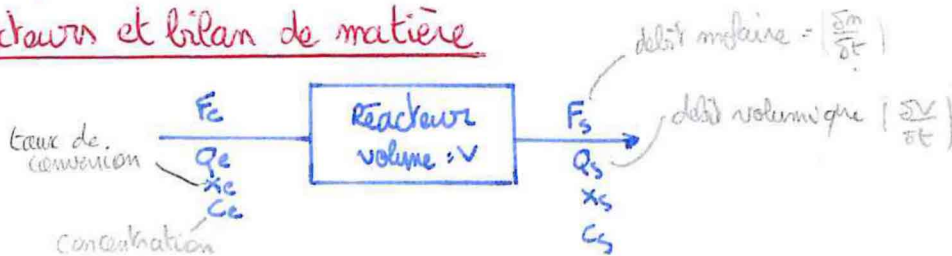


# Reacteurs

Inconvénients des réacteurs formés =

- difficile de suivre les tps de réaction aux temps courts.
- impose des temps de vidange et un fonctionnement par cycle.
- Systèmes dans des états transitoires (SQ variable...)

## Reacteurs et bilan de matière



Pour un fluide incompressible avec une section fixe:  $Q_e = Q_s$

$$F_{i,e} = C_{i,e} Q_e$$

Temps de passage =  $\tau = \frac{V}{Q_e}$  = temps mis pour renouveler un volume de réactif égal à celui du réacteur.  
 ≠ temps de conversion de Q.

Temps de séjour: temps que passe une particule de fluide dans le réacteur.

Taux de conversion =  $X = \frac{C_e - C_s}{C_e}$  % de réactif ayant été consommé.

Bilan sur un réacteur quelconque =

Bilan sur un volume fixe  $dV$  pendant  $dt$  =

$$F_{i,i} dt = F_{i,s} dt + \frac{dm_i}{dt} dt - \sum_R \int_V \nu_{iR} \tau_R dV dt$$

coeff stoechi  
volume de react

Pour  $A \rightarrow B$

$$F_{A,i} dt = F_{A,s} dt + V r dt$$

$$F_{B,i} dt = F_{B,s} dt - V r dt$$

## Reacteur continu parfaitement agité (RPAC)

Hypothèses:

- composition fixée par les grandeurs en sortie:  $C_i = C_{s,i}$  en tout point du réacteur.
- ⇒ temps de mélange est court.

Conséquence pour une réaction unique =

$$F_{i,i} = F_{i,s} - V r$$

$$\heartsuit \frac{F_{s,i} - F_{i,i}}{V} = r$$

volume de react

Pour un fluide incompressible:

$$Q(C_{s,i} - C_{e,i}) = C_{s,i} - C_{e,i} = V r$$

Σ [A<sub>j</sub>]<sup>ν<sub>j</sub></sup>

Reactions A → B :  
 On peut se servir de la formule en introduisant le taux de conversion :  $[A]_0 - [A]_t = [A]_0 (1 - X_A)$

$$[A]_0 - [A]_t = r_A [A]_0 = r_A [A]_0 \Rightarrow -X_A [A]_0 = r_A [A]_0 \Rightarrow \boxed{[A]_0 (1 - X_A) = r_A t}$$

Pour A :  $r = -\frac{1}{V} \frac{d[A]}{dt} = \frac{1}{V} \frac{d[B]}{dt}$

⇒ on a les mb différentielles et intégrales.

ordre	0	1	2
Relet	$Z = X_A C_{A0}$	$Z = X_A \frac{r_{A0}}{1 - X_A}$	$Z = X_A \frac{r_{A0}}{C_{A0} (1 - X_A)^2}$
Taux de conversion	$X_A = \frac{Z}{C_{A0}}$	$X_A = \frac{r_{A0} Z}{1 + r_{A0} Z}$	$X_A = \frac{r_{A0} Z}{1 + 2r_{A0} Z}$

Si l'ordre est supérieur à 1, la réaction est dépeuplée dans un RPA c'est à dire le contact dans le réacteur est en série que celle en entrée.

### Réacteur piston ≡ suite de bécot sur un tuyau mouvant

#### Hypothèses

- Il est possible de découper le réacteur en tranches de fluide se déplaçant au sein du réacteur.
- Il n'y a pas d'échange de matière entre différentes tranches ou de l'écoulement.
- au sein d'une tranche la composition est homogène.

#### Conséquence pour une réaction unique

$f_{A0} = F_{A0} - \sum V r_A$  (pas d'entrée, on compte la consigne dans une tranche)  
 ⇒  $-\frac{dF_A}{dV} = -\sum V r_A$  avec  $F_A = F_{A0}$  donc  $\sum V r_A = F_{A0} \frac{dC_A}{dV} + C_A \frac{dF_{A0}}{dV}$

niveau de matière due à la réaction chimique  
 doit matière due à la réaction chimique  
 niveau de matière due à la réaction chimique  
 due à des effets autres (ex: T, p)

Pour A → B :  $r_A = -r_B$   
 $[A] = C_A (1 - X_A)$   
 $C_{A0} = C_A (1 - X_A)$   
 temps du réacteur

$$\frac{d[A]}{dV} = -C_A \frac{dX_A}{dV}$$

$$r_A = F_{A0} \frac{dX_A}{dV} \Rightarrow \int_{X_{A1}}^{X_{A2}} r_A dV = F_{A0} \int_{X_{A1}}^{X_{A2}} \frac{dX_A}{V}$$

$$V = F_{A0} \int \frac{dX_A}{r_A (1 - X_A)^2}$$

On peut faire apparaître le temps de séjour :  $\frac{dV}{F_{A0}} = \tau = \frac{dX_A}{r_A (1 - X_A)^2}$

$$dV = \frac{F_{A0}}{r_A (1 - X_A)^2} dX_A = C_{A0} \frac{dX_A}{r_A (1 - X_A)^2}$$

ordre  
 Réaction  
 Taux de conversion

0	$Z = X_A C_{A0}$	$Z = X_A \frac{r_{A0}}{1 - X_A}$	$Z = X_A \frac{r_{A0}}{C_{A0} (1 - X_A)^2}$
1	$X_A = \frac{Z}{C_{A0}}$	$X_A = \frac{r_{A0} Z}{1 + r_{A0} Z}$	$X_A = \frac{r_{A0} Z}{1 + 2r_{A0} Z}$
2	$X_A = \frac{r_{A0} Z}{1 + r_{A0} Z}$	$X_A = \frac{r_{A0} Z}{1 + 2r_{A0} Z}$	$X_A = \frac{r_{A0} Z}{1 + 3r_{A0} Z}$

Taux de conversion  
 $X_A = \frac{Z}{C_{A0}}$   
 $X_A = \frac{r_{A0} Z}{1 + r_{A0} Z}$   
 $X_A = \frac{r_{A0} Z}{1 + 2r_{A0} Z}$

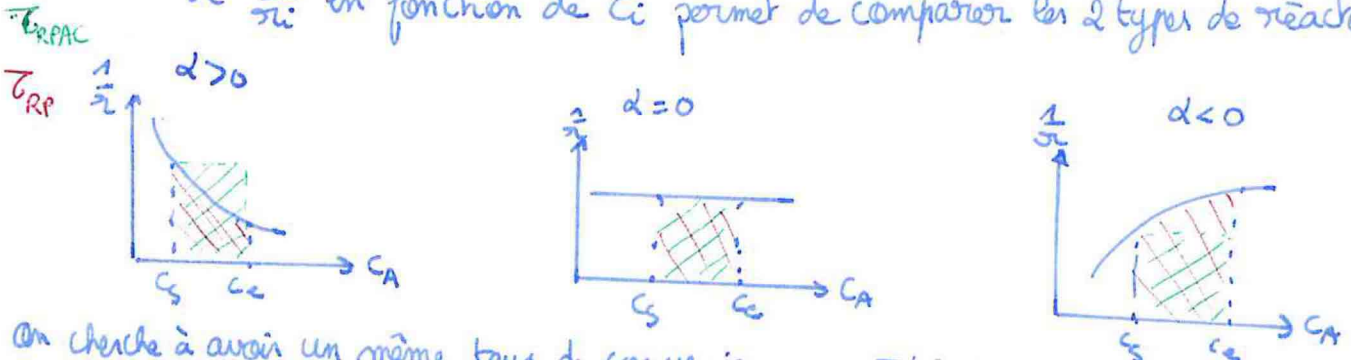
# Éléments de comparaison

## Outil graphique

Pour le RPAC on a vu:  $\tau = \frac{C_0 X_A}{r} = - \int_{C_0}^{C_A} \frac{dC_A}{r}$   
 $= - \frac{C_0 i - C_A i}{r}$

Pour le RP:  $t_s = \tau = - \int_{C_0}^{C_A} \frac{1}{r} dC_A$

Le tracé de  $\frac{1}{r_i}$  en fonction de  $C_i$  permet de comparer les 2 types de réacteurs.



On cherche à avoir un même taux de conversion pour  $\tau$  (le temps de passage) le  $\oplus$  faible: RPAC favorable si  $\alpha < 0$  sinon: réacteur piston car si  $\alpha > 0$   $r \oplus$  grande si  $C \oplus$  élevée.  
 Pour une réaction bi-molec:  $A+B \rightarrow C = r = k C_A C_B$  et  $C_B = C_0(1-X_A)$

## Agencements de réacteurs

RPAC en série: on approxime l'intégrale sous la courbe par une succession de rectangles (mt des rectangles).

Pour chaque réacteur  $\tau_j = \frac{C_{j-1} - C_j}{k C_j} \Rightarrow \frac{C_{j-1}}{C_j} = 1 + k \tau_j$  d'où  $\frac{C_0}{C_j} = \prod_{i=1}^j (1 + k \tau_i)$   
 si  $k \tau_i = R Z_i$  pour chaque réacteur (mV):  $\frac{C_0}{C_j} = (1 + R Z_i)^j \Rightarrow \tau_{tot} = j \tau_i = \frac{1}{k} \left( \sqrt{\frac{C_0}{C_j}} - 1 \right) \rightarrow \tau_{RP}$

## Optimisation de la température

Distinguer les cas: irréversible / réversible; exot / endot; isOT / adiabatique.

$r = k C_A = A e^{-\frac{E_A}{RT}} C_0 (1-X_A) \Rightarrow$  on remplace  $k$  par son expression en fct de  $T$ .

En fonctionnement réversible  $K = \frac{k_1}{k_{-1}}$  et  $\frac{d \ln K}{dT} = \frac{\Delta_r H^0}{RT^2}$

## Progenion optimale de température

On peut déterminer le taux d'avancement optimal en fonctionnement isOT mais aussi en non isOT = on cherche à minimiser le temps de passage pour avoir un taux de conversion donné.

$\tau = C_0 \int_0^X \frac{dX_A}{r(X_A, T)}$   $\Rightarrow$  on cherche à maximiser  $r(X_A, T)$ .

$\rightarrow$  on prend l'enveloppe des  $r(X_A, T)$  et on obtient la progenion optimale de température.

$\Delta$  pour un RP il est dur d'avoir un fonctionnement isOT (la chaleur libérée dépend de l'avancement donc de  $x$ )

