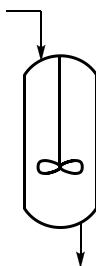


Points de fonctionnement d'un réacteur -TD 10
Correction exercice 3

1. On envisage le RPAC dans lequel est réalisée la réaction $R \rightarrow 2P_1 + P_2$, ses caractéristiques sont reprises sur le schéma suivant :



Le taux de conversion du réactif R est défini à partir des flux molaires selon $F_{Rs} = F_{re} (1 - X)$

Bilan de matière en fonction du taux de conversion : il suffit de dresser le tableau d'avancement

| | R | 2P ₁ | P ₂ |
|--------|------------------|-----------------|----------------|
| Entrée | $F_{Re} = C_0 Q$ | | |
| Sortie | $F_{Re} (1 - X)$ | $2 F_{Re} X$ | $F_{Re} X$ |

Bilan de matière en fonction de la vitesse : on revient à l'expression générale du bilan de matière pour une espèce en régime permanent :

$$\text{débit entrant} + \text{débit produit} = \text{débit sortant} + \text{débit d'accumulation}$$

Soit en régime permanent :

$$F_{ie} + F_{ip} = F_{is} \quad \text{ou} \quad F_{ie} + \bar{v}_i r V = F_{is}$$

Réactif R : $F_{Re} - r V = F_{Rs}$

Produit P₁ : $2r V = F_{P1s}$

Produit P₂ : $r V = F_{P2s}$

2. En introduisant le taux de conversion dans la relation traduisant le bilan de matière pour le peroxyde, on obtient

$$\cancel{F_{Re}} - r V = F_{Rs} = \cancel{F_{Re}} (1 - X)$$

$$r V = F_{Re} X$$

On a par ailleurs $r = k [R]$ où $[R]$ est la concentration du peroxyde dans le réacteur, cette concentration est égale à celle en sortie : $[R] = F_{Rs} / Q$

$$k \frac{F_{Rs}}{Q} V = F_{Re} X \Leftrightarrow k \cancel{F_{Re}} (1 - X) \tau = \cancel{F_{Re}} X$$

En conclusion :

$$X = \frac{k\tau}{1+k\tau} = \frac{1}{1+\frac{1}{k\tau}}$$

Script Python :

▪Créer un tableau numpy correspondant à l'intervalle de températures imposé

▪Définir une fonction $X_{cin}(T) = X_{cin}(T) = \frac{1}{1 + \frac{1}{k_0 \exp(-\frac{E_a}{RT})\tau}}$

ou définir une fonction k (T) puis une fonction X (T)

▪Créer un tableau numpy contenant les valeurs de X

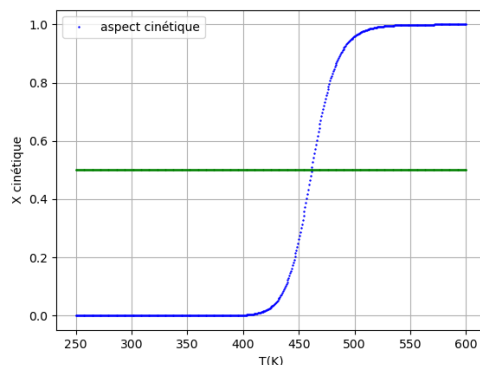
```
Temp= np.linspace ( 250,600,500)

#calcul des valeurs de k pour chaque température
def k(T):
    return k0*np.exp(-Ea/R/T)

#calcul du taux de conversion pour chaque température #
def XI(T):
    Y = tau*k(T)
    return Y/ (1+Y)

Xcin=XI(Temp)
```

Courbe obtenue :



On détermine graphiquement $X > 50\%$ pour $T > 460$ K

3. L'application du 1^{er} principe de la thermodynamique au réacteur ouvert conduit à

$$q = \sum F_{is} h_{is} - \sum F_{ie} h_{ie} + \left(\frac{dU}{dt} \right)_t$$

En régime permanent et en introduisant les approximations usuelles, cette expression se réécrit :

$$q = (\sum F_{ie} c_i)(T_s - T_e) + rV_R \Delta_r H^\circ \text{ ou } q = C_m \mu Q_e (T - T_e) + rV_R \Delta_r H^\circ$$

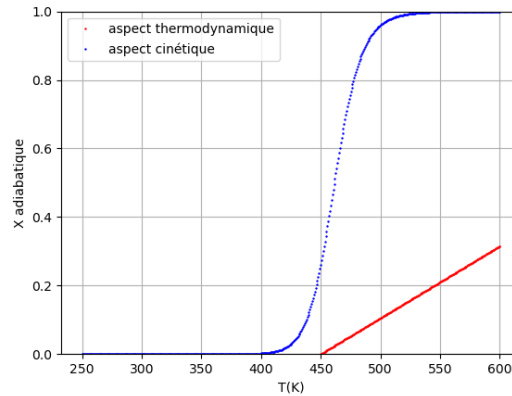
4. Pour un fonctionnement en mode adiabatique $q=0$, soit

$$T = T_e + J X \text{ avec } J = -\frac{C_0 \Delta_r H^\circ}{C_m \mu} \text{ ou } X = \frac{T - T_e}{J}$$

Script Python : il suffit de définir une fonction $X_{adia}(T)$ et de créer un tableau renvoyant les valeurs de cette fonction sur l'intervalle de températures considéré

```
#2-Aspect thermodynamique , fonctionnement adiabatique "
J=-CRe*DrHO/Cp/mu
def X2 (T):
    return (T-Te)/J
Xadia =X2(Temp)
```

Pour $T_e = 450 \text{ K}$, on obtient la courbe :



Les deux courbes n'ont pas de points d'intersection : il n'existe pas de point de fonctionnement .

5. Pour le réacteur double enveloppe , on a $q = US (T_{eau} - T)$; on obtient alors

$$US(T_{eau} - T) = C_m \mu Q_e (T - T_e) + rV \Delta_r H^\circ = C_m \mu Q_e (T - T_e) + C_0 Q_e X \Delta_r H^\circ$$

Soit
$$X = \frac{US(T_{eau} - T) - C_m \mu Q_e (T - T_e)}{C_0 Q_e \Delta_r H^\circ} \quad \text{ou} \quad X = \frac{US(T_{eau} - T) - C_m \mu \frac{V}{\tau} (T - T_e)}{C_0 \frac{V}{\tau} \Delta_r H^\circ} = \frac{US(T_{eau} - T)}{C_0 \frac{V}{\tau} \Delta_r H^\circ} + \frac{(T - T_e)}{J}$$

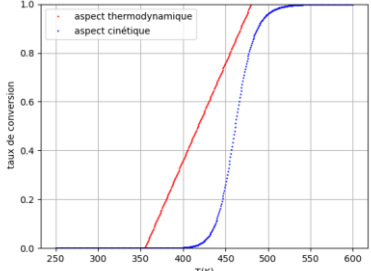
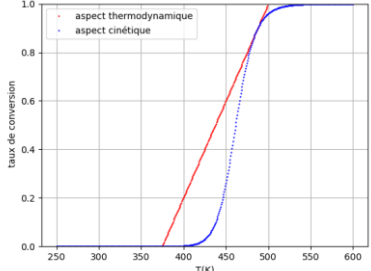
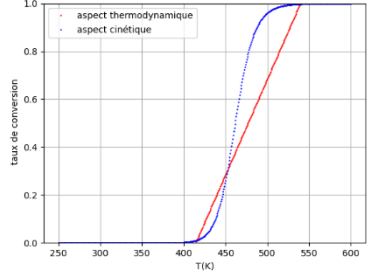
Script Pyhton :

```
#3-Aspect thermodynamique, avec refroidissement par l'eau #
S= 314e-4 #surface d'échange en m2#
U = 80 # coefficient d'échange , W/m2/K
Teau=293 #température de l'eau en K#

E=S*U/(CRe*VR/tau)/DrHO

def X3(T):
    return E*(Teau-T)+(T-Te)/J
Xexchange = X3(Temp)
```

Les courbes obtenues pour $T_e = 450 \text{ K}$ et $T_e = 600 \text{ K}$ sont représentées ci-dessous :

| $T_e = 450 \text{ K}$ | $T_e = 500 \text{ K}$ | $T_e = 600 \text{ K}$ |
|---|---|--|
|  |  |  |
| <p>Pas de point de fonctionnement</p> | <p>1 point de fonctionnement stable dans la partie haute</p> | <p>1 point de fonctionnement instable 2 points de fonctionnement stables dont un intéressant : taux de conversion égal à 1</p> |