PC\* 2022/ 2023

Bellevue

**TD 10 : Procédés industriels continus**

**Exercice 1.** On considère la synthèse de l’ammoniac en phase gazeuse homogène selon l’équation bilan :

N2 + 3 H2 = 2NH3 ou A1 + 3 A2 = 2 A3

Le réacteur dans lequel est réalisé cette synthèse est alimenté par du diazote N2 et du dihydrogène H2 pur .

On adopte les notations suivantes :

 : débit molaire global

 : débit massique global

débit ou flux molaire de l’espèce Ai en entrée

débit ou flux molaire de l’espèce Ai en sortie

débit ou flux massique de l’espèce Ai en entrée

débit ou flux molaire de l’espèce Ai en sortie

xi : fraction molaire de l’espèce Ai en sortie

wi : fraction massique de l’espèce Ai en sortie

x : l’avancement molaire de la réaction et

1) Etablir en fonction de et de le bilan molaire associé à chacune des espèces et le bilan molaire global en régime transitoire et en régime permanent . Quelle relation existe -t-il entre les deux bilans ?

Même questions pour les bilans massiques .

2) Le fonctionnement du réacteur peut être également caractérisé par des bilans atomiques .

Etablir le bilan atomique pour l’azote et l’hydrogène .

On désigne par N le nombre total de moles d’atomes : exprimer N en fonction des quantités de matière en mole des différentes espèces chimiques .

Exprimer dN/dt en régime transitoire .

***Exercice 2 :***

On réalise la réaction d’équation bilan A1 → A2 dans différents types de réacteurs . Pour tous les types de réacteur envisagés , la concentration de A1 dans l’alimentation est C1e = 0 ,1 molL-1 et le produit A2 n’est pas présent dans l’alimentation et le réacteur fonctionne dans des conditions isothermes .

On note C1s la concentration en A1 dans le soutirage et Q le débit volumique total , supposé constant.

Par ailleurs la réaction est d’ordre 0 par rapport à A2 et d’ordre 1 par rapport à A1 .

1. La premier réacteur envisagé est un RPAC de volume V = 100 L . Lors d’une étude expérimentale de ce réacteur , on a déterminé les valeurs de C1s dans le soutirage pour différentes valeurs du débit volumique total Q . Les résultats sont indiqués dans le tableau suivant :

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Q Lmin-1 | 10 | 20 | 30 | 50 | 100 |
| C1s  / C1e | 1/15 | 1/8,1 | 1/5,6 | 1/3,8 | 1 / 2,4 |

1a.Déterminer la valeur de la constante de vitesse k.

1b. Déterminer le taux de conversion de A1 pour un débit volumique total de 50 L min-1 .

2. Déterminer le taux de conversion de A1 si on utilise deux RPAC de 50 L chacun disposés en série .

3. On envisage enfin un réacteur piston .

Etablir la relation le temps de passage  et les concentrations C1s et C1e .

Déterminer le taux de conversion de A1 en supposant que le volume du réacteur piston est de 100 L et que le débit volumique total reste égal à 50 Lmin1 .

Conclure .

4. Il est fréquent d’avoir des réactions compétitives .On considère ici par exemple la fabrication de la méthylolurée ,intermédiaire dans la fabrication des uroplastes .

La méthylolurée NH2CONHCH2OH ( composé A3) se forme dans une solution aqueuse à 35°C et pH = 5 par réaction entre l’urée NH2CONH2 ( composé A1) et le formol ( nom commun du méthanal en solution aqueuse , composé A2) selon l’équation bilan :

NH2CONH2 + H2CO→  NH2CONHCH2OH réaction ( 1)

A1 A2 A3

Mais dans le milieu , il peut aussi se produire la réaction (2) d’équation bilan :

NH2CONHCH2OH + NH2CONH2 → NH2CONHCH2NHCONH2 + H2O réaction (2)

A3 A1 A4 A5

Chacune des deux réactions est d’ordre 1 par rapport à chacun des réactifs ; leurs constantes de vitesse ont pour valeur k1 = 3,36.10-4 mol-1 L s-1 k2 = 4,02.10-5 mol-1 Ls-1 .

La production de méthylolurée ( composé A3) est envisagée dans un réacteur piston RP.On opère en présence d’un exces d’urée : dans l’alimentation , la concentration en formol est de 0 ,5 molL-1 , celle de l’urée est de 5 molL-1 et il n’ y a pas de méthylolurée.

Q désigne le débit volumique total ; on pose t = V / Q où V est le volume balayé par le mélange réactionnel depuis l’entrée .

4a.Que représente t ?

4b. Etablir l’expression de la concentration en méthanal ( A2) le long du réacteur en fonction de t .

4c.Etablir l’expression de la concentration en méthylolurée (A3) le long du réacteur en fonction de t .

Déterminer la valeur tmax  de t pour laquelle cette concentration est maximale , déterminer alors le taux de conversion de l’urée en méthylolurée .

4d.Le réacteur piston RP , supposé cylindrique est caractérisé par sa longueur l et son diamètre interne D. Déterminer le rapport l / D optimal correspondant à une concentration maximale en méthylolurée en sortie , le débit volumique global étant de 50 Lmin-1 .

***Exercice 3*** : On étudie la décomposition du peroxyde de di-tertiobutyle en acétone et éthane selon l’équation bilan :

(CH3)3C-O-O-C-(CH3)3 → 2 CH3 – CO – CH3 + C2H6

R → 2P1 + P2

Cette réaction suit une cinétique du 1er ordre avec k (T) = k0 exp ( -Ea/RT) ; k0 = 1015 et Ea = 157 kJmol-1 .

D’autre part rH° = - 150 kJmol-1

Cette réaction est réalisée dans un RPAC de volume V = 0,52 L ; la concentration du peroxyde dans l’alimentation est C0 = 4 molL-1 .

On note Q le débit volumique total supposé constant ; le temps de passage est égal à 600s.

Dans toute la suite on se placera en régime permanent.

1. Ecrire le bilan de matière pour le réactif R et les produits P1 et P2 en fonction du flux molaire du peroxyde R en entrée ( FRe) de son taux de conversion X et de la vitesse volumique r de la réaction .

2. En déduire l’expression du taux de conversion X en fonction de la constante de vitesse k et du temps de passage t sous la forme Xcin (T) .

Ecrire le script Python afin de tracer les variations du taux de conversion X en fonction de la température sur un intervalle de température [250K , 650 K].

A partir de la courbe obtenue , déterminer la température à partir de laquelle le taux de conversion est supérieur à 50 % .

Dans la suite , on cherche à savoir s’il y a des risques d’emballement de la réaction .

On donne les caractéristiques suivantes du système chimique :

Capacité massique moyenne Cm = 2100 JK-1kg-1 , masse volumique m = 900 kgm-3

On note Te la température au niveau de l’alimentation .

3 . Etablir le bilan thermique du réacteur en introduisant les grandeurs moyennes introduites pour le mélange réactif .

4. On envisage un fonctionnement en mode adiabatique . Etablir alors l’expression du taux de conversion X en fonction de la température T sous la forme Xadia ( T)

Compléter le script Python précédent de façon a tracer sur le même graphe les variations de Xcin  et de Xadiabatique  en fonction de la température T pour une température d’entrée Te = 450 K . Commenter .

5. On envisage un autre mode de fonctionnement : on envisage un réacteur double enveloppe avec une circulation d’eau à la température Teau = 293 K .

Les échanges thermiques entre l’eau et le réacteur sont supposés suivre la loi de Newton avec un coefficient d’échange U = 80 W m-2K-1 et une surface d’échange S = 314 cm2 .

Etablir alors l’expression du taux de conversion X en fonction de la température T sous la forme X ( T)

Compléter le script Python précédent de façon à tracer les variations de Xcin  et de X en fonction de la température T pour une température d’entrée Te = 450 K . Commenter .

Meme question pour une température d’entrée Te = 500 et 600K .