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 :

$\dot{n}$ : débit molaire global

$\dot{m}$ : débit massique global

 $\dot{n\_{ie}}$ débit ou flux molaire de l’espèce Ai en entrée

$\dot{n\_{is}}$ débit ou flux molaire de l’espèce Ai en sortie

$\dot{m\_{ie}}$ débit ou flux massique de l’espèce Ai en entrée

$\dot{m\_{is}}$ 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 $\dot{ξ}=\frac{dξ}{dt}$

1) Etablir en fonction de $\dot{n}$ et de $\dot{ξ}$ 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 .