

Capacité numérique : A l'aide d'un langage de programmation, déterminer le(s) point(s) de fonctionnement (température et taux de conversion) d'un réacteur parfaitement agité continu siège d'une transformation modélisée par une réaction unique et en discuter la stabilité

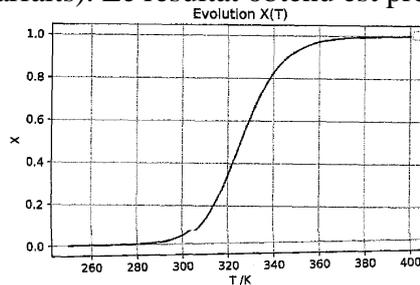
On étudie la réaction $A \rightarrow B$ d'ordre 1 par rapport à A en milieu liquide, La réaction est mise en oeuvre dans un réacteur continu parfaitement agité de volume $V_0 = 10,0 \text{ m}^3$ alimenté par un débit volumique $Q_e = 1,0 \cdot 10^{-2} \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$. La concentration de l'espèce A en entrée de réacteur est C_{Ae} et la masse volumique du fluide est notée r . L'enthalpie standard de la réaction est notée $\Delta_r H^\circ$. Le débit volumique de sortie est égal au débit volumique d'entrée.

Données :

$\Delta_r H^\circ = -20,0 \text{ kJmol}^{-1}$; $C_{Ae} = 5,0 \cdot 10^3 \text{ molm}^{-3}$; $\rho = 850 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$;
capacité thermique massique du fluide étudié : $C_{p,m} = 2200 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{kg}^{-1}$

1. Indiquer comment varie le taux de conversion de A noté X en fonction de la température T . On précise que la constante de vitesse k_1 associée au processus $A \rightarrow B$ suit la loi d'ARRHENIUS avec $A_1 = 1,0 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}$ (facteur préexponentiel) et $E_{a1} = 99,7 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ (énergie d'activation).

2. Proposer un programme en langage Python permettant d'effectuer le tracé de $X = f(T)$, On rappelle que $R = 8,31 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$ (constante des gaz parfaits). Le résultat obtenu est présenté à la figure suivante.



3. Réaliser le bilan thermique relatif à ce réacteur et proposer les trajectoires de température suivies dans le cas d'un fonctionnement en marche adiabatique. Tracer les trajectoires pour des températures d'alimentation $T_E = 290 \text{ K}$, 300 K et 310 K sur le graphe précédent et en déduire dans chaque cas les températures de sortie du réacteur.

4. La température d'entrée évolue de façon croissante. On appelle température d'allumage du réacteur (*ignition*) la température d'entrée permettant d'accrocher pour la première fois un point de fonctionnement sur la branche chaude de l'évolution $X = f(T)$. Déterminer graphiquement cette température dans le cas du réacteur en marche adiabatique.

5. On constate qu'une réaction parasite apparaît si $T > 340 \text{ K}$ et on souhaite éviter cette réaction. On alimente alors le réacteur à la température $T_E = 310 \text{ K}$ et on refroidit le réacteur à l'aide d'un serpentin immergé dans le mélange. On désire obtenir un taux de conversion égal à 80 %. Quelle est la température de sortie du mélange réactionnel ? Quelle puissance thermique (flux thermique) doit-on évacuer du réacteur ?

6. On fonctionne de nouveau en marche adiabatique avec une température d'entrée $T_E = 300 \text{ K}$. Un incident dans le circuit d'alimentation provoque un doublement soudain du débit volumique. Que se passe-t-il ? Il sera utile d'utiliser les évolutions $X(T)$ fournies en données.

7. On fonctionne toujours en marche adiabatique. La réaction devient explosive au-dessus de 330 K. Par sécurité, on travaille en point froid (taux de conversion égal à 6 % pour une température d'entrée égale à $T_E = 303$ K).

La canalisation d'entrée s'encrasse lentement et le débit volumique d'alimentation passe de $1,0 \cdot 10^{-2} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ à $0,5 \cdot 10^{-2} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$. Que se passe-t-il? Il sera utile d'utiliser les évolutions $X(T)$ fournies en données.

Courbes fournissant l'évolution du taux de conversion X en fonction de la température pour différents temps de passage :

