DL5 – Exercice 2 – réacteurs industriels

> **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

1. La réponse à cette question suppose d'avoir une relation entre le taux de conversion et la température …ou entre le taux de conversion et la constante de vitesse qui ne dépend que de T ….relation classique obtenue à partir du bilan de matière pour A .

Avec les notations du cours :
F : débit molaire ; Q : débit volumique identique en entrée et sortie
X : taux de conversion de A ; τ : temps de passage , $\tau = \frac{V_0}{Q}$
$F_{A\,e} - r\,V_0 = F_{As} = F_{A\,e}\,(1 - X)$ et pour une réaction d'ordre 1 $r = k\,[A]_s = k\,F_{A\,s} / Q$
$- r\,V_R = - F_{A\,e}\,X$
$k\,\frac{\cancel{F_{A\,e}}\,(1-X)}{Q} V_0 = \cancel{F_{A\,e}}\,X$ ou $k\,(1 - X)\,\tau = X$

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

En utilisant la loi d'Arrhénius : $k = A \exp(-E_a / RT)$, k est une fonction croissante de T. On en déduit :

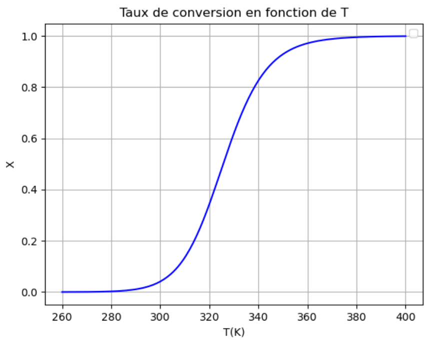
X est une fonction croissante de T .

Q2. Code Python

```
#Q1. Taux de conversion en fonction de la température
# calcul de la constante de vitesse
def k(T) :
    return A*np.exp(-Ea/R/T)
#taux de conversion
 tp = V0/Q
def X(T):
    return tp*k(T)/(1+tp*k(T))

Te=np.linspace(260,400,200)
Y=X(Te)

# Courbe taux de conversion en fonction de la température
plt.figure(1)
plt.plot(Te,Y,'b',markersize=1)
plt.grid()
plt.xlabel("T(K)")
plt.ylabel("X")
plt.title("Taux de conversion en fonction de T" )
plt.legend()
plt.show()
```



Q3. L'application du 1er premier principe au réacteur ouvert conduit à l'expression générale de la puissance thermique (quantité d'énergie thermique échangée avec l'extérieur par unité de temps)

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

On suppose que l'on se place en régime permanent (ou stationnaire) : $\left(\frac{dU}{dt}\right)_t = 0$

Par ailleurs , le réacteur fonctionne en marche adiabatique : q = 0

Ainsi pour le système chimique étudié

$$F_{inerte\ s}\, h_{inerte\ s} - F_{inerte\ e}\, h_{inerte\ e} + F_{As}\, h_{As} + F_{Bs}\, h_{Bs} - F_{Ae}\, h_{Ae} + F_{Be}\, h_{Be}$$

Or $F_{inerte\ s} = F_{inerte\ e}$; $F_{A\ s} = F_{Ae}\,(1 - X)$, $F_{Be} = 0$, $F_{Bs} = F_{Ae}X$

Ainsi , on obtient $F_{inerte\ e}\ C_{pinerte}\,(T_s - T_e) + F_{Ae}\, C_{PA}\,(T_s - T_e) + F_{Ae}\, X\, \Delta_r H° = 0$

Compte tenu des approximations proposées dans l'énoncé : $F_{inerte\ e}\ C_{pinerte} + F_{Ae}\, C_{PA} = \rho\, Q_e\, C_{pm}$

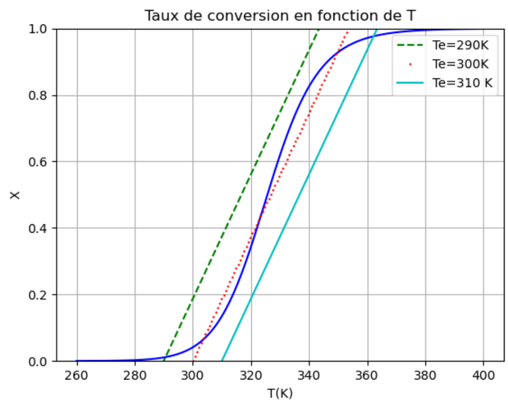
soit $\underline{\boldsymbol{\rho\, Q_e\, C_{pm}\,(T_s - T_e) + F_{Ae}\, X\, \Delta_r H° = 0}}$

Finalement : $T_s = T_e - \frac{F_{Ae}\Delta_r H°}{\rho Q_e C_{pm}} X$ et $F_{Ae} = C_{Ae}\, Q_e$ $\boxed{\boldsymbol{T_s = T_e - \frac{C_{Ae}\Delta_r H°}{\rho C_{pm}} X}}$

Ce qui se réécrit : $\boldsymbol{X = -\frac{\rho C_{pm}}{C_{Ae}\Delta_r H°}(T_s - T_e)}$ A.N. $\frac{850*2200}{5.10^3*20.10^3} = 0.0187$

$\boxed{\mathbf{X = 0.0187\ (T_s - T_e)}}$

Code Python :

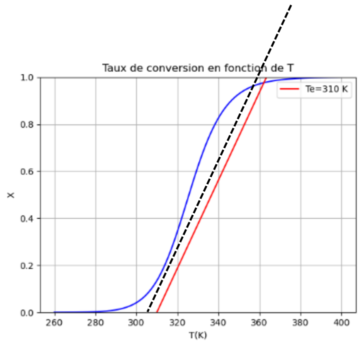


Pour T_e = 290 K , le seul point de fonctionnement éventuel correspond à un taux de conversion pratiquement nul : pas interessant .

Pour T_e = 300 K , on observe 3 points de fonctionnement dont un dans la partie haute et c'est un point de fonctionnement stable .

Pour T_e = 310 K , on n'observe qu'un seul point de fonctionnement : il est stable et situé dans la partie haute : c'est la situation la plus favorable .

4. On cherche la température d'entrée <u>la plus faible</u> pour laquelle la droite 0.0187 (T – T_e) coupe la courbe X (T) dans la partie haute en un seul point , c'est-à-dire la température d'entrée la plus faible pour laquelle l'évolution est la même que celle observée pour T = 310 K ci-dessus **.**



Graphiquement , on peut déterminer $T_e \simeq 305$ K

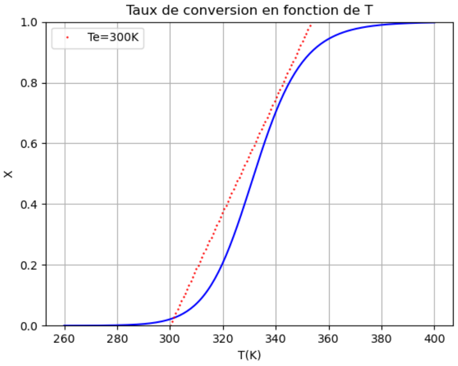
5. Sur la courbe cinétique (courbe bleue) , il apparait que le taux de conversion est de l'ordre de 80 % si le milieu réactionnel atteint une température de ≃ 338K .
Pour éviter que la température dépasse 340K , il faut donc évacuer l'énergie thermique produite par la réaction , c'est-à-dire l'énergie thermique échangée par le milieu réactionnel et l'extérieur , soit q.
En reprenant le sexpressions de la question 3 : $\mathbf{q_{évacué} = \rho\, Q_e\, C_{pm}\, (T_s - T_e) + F_{Ae}\, X\, \Delta_r H°}$

A.N. T_s = 338 K et X = 0,80 $\mathbf{q_{évacué}}$ **= - 276 400 Js^{-1} ou - 276 kW**

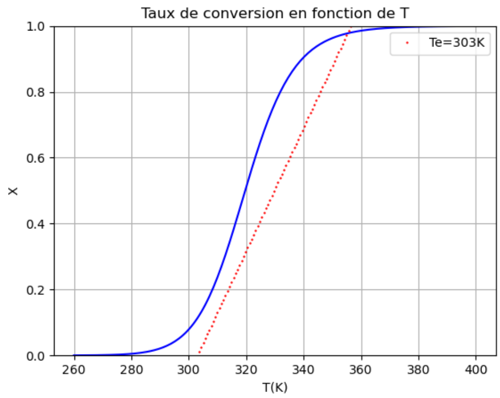
6. Une modification du débit volumique d'entrée entraine une modification du temps de passage

$\tau = \frac{V_0}{Q}$; pour Q' = 2 Q , $\tau' = \frac{V_0}{2Q} = \frac{\tau}{2}$

Dans les conditions initiales τ = 1000s
En se reportant sur la courbe fournie pour τ = 500 s , on constate qu'il n'y a plus qu'un seul point de fonctionnement situé dans la partie basse , correspondant à un taux de conversion inférieur à 5 % : il vaut mieux éviter l'incident dans le circuit d'alimentation .



7. Lorsque le débit volumique est divisé par 2 , le temps de passage est doublé .On obtient alors



Le point de fonctionnement correspond à une température nettement supérieure à 330K : l'accident industriel est inévitable .