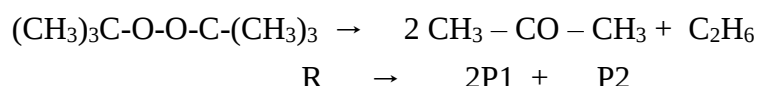


Capacité numérique : à l'aide d'un langage de programmation, déterminer le(s) point(s) de fonctionnement (température et taux de conversion) d'un réacteur parfaitement agité continu siège d'une transformation modélisée par une réaction unique et en discuter la stabilité

On étudie la décomposition du peroxyde de di-tertiobutyle en acétone et éthane selon l'équation bilan :



Cette réaction suit une cinétique du 1^{er} ordre avec $k(T) = k_0 \exp(-E_a/RT)$; $k_0 = 10^{15}$ et $E_a = 157 \text{ kJmol}^{-1}$.
D'autre part $\Delta_r H^\circ = -150 \text{ kJmol}^{-1}$

Cette réaction est réalisée dans un RPAC de volume $V = 0,52 \text{ L}$; la concentration du peroxyde dans l'alimentation est $C_0 = 4 \text{ molL}^{-1}$.

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.

Q1. 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 (F_{Re}) de son taux de conversion X et de la vitesse volumique r de la réaction.

Q2. En déduire l'expression du taux de conversion X en fonction de la constante de vitesse k et du temps de passage τ sous la forme $X_{cin}(T)$.

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 $C_m = 2100 \text{ JK}^{-1}\text{kg}^{-1}$, masse volumique $\mu = 900 \text{ kgm}^{-3}$

On note T_e la température au niveau de l'alimentation.

Q3. Etablir le bilan thermique du réacteur en introduisant les grandeurs moyennes introduites pour le mélange réactif.

Q4. 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 $X_{adia}(T)$

Compléter le script Python précédent de façon à tracer sur le même graphe les variations de X_{cin} et de $X_{adiabatique}$ en fonction de la température T pour une température d'entrée $T_e = 450 \text{ K}$. Commenter.

Q5. On envisage un autre mode de fonctionnement : on envisage un réacteur double enveloppe avec une circulation d'eau à la température $T_{eau} = 293 \text{ K}$.

Les échanges thermiques entre l'eau et le réacteur sont supposés suivre la loi de Newton avec un coefficient d'échange $U = 80 \text{ W m}^{-2}\text{K}^{-1}$ et une surface d'échange $S = 314 \text{ cm}^2$.

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 X_{cin} et de X en fonction de la température T pour une température d'entrée $T_e = 450 \text{ K}$. Commenter.

Même question pour une température d'entrée $T_e = 500$ et 600K .