Chapitre3

Etude des réacteurs idéaux isothermes

Elaboration des équations bilans

Les Réacteurs chimiques idéaux sont :

- Réacteur fermé agité (RF)
- Réacteur parfaitement agité continu (RPAC)
- Réacteur piston (RP)

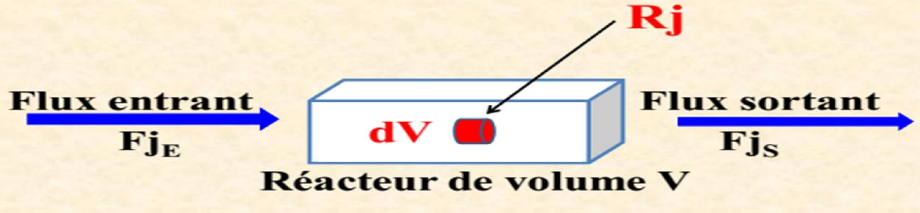
Introduction

L'étude d'une réaction chimique consiste à faire des calculs appelés **bilans** qui nous renseignent sur la **rentabilité de l'opération :**

- **Taux de conversion**
- **Température du travail**
- **Volume nécessaire du réacteur**

Il faut choisir le réacteur nécessitant *le plus petit volume* et donnant *la meilleure conversion* .

I- Formulation générale des équations de bilan de matière :

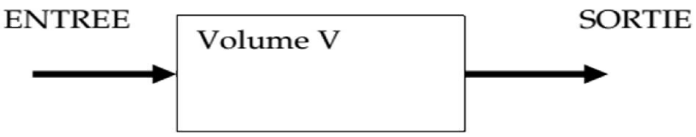


Bilan de matière en Aj :

Entrée = Sortie + Consommation + Accumulation

Entrée + Production = Sortie + Accumulation

1. Ecriture du bilan matière sur un volume de réacteur :



Débit entrant + Débit de production = Débit sortant + Accumulation
(dans V) (par la réaction) (de V) (temps)

Bilan sur A sur le volume V :

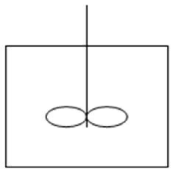
$F_{Ae} + r_A V = F_{As} + d n_A / d t$

Chaque terme est un flux de matière (mole/s). Les termes de production et d'accumulation peuvent être positifs ou négatifs.

1.1 Réacteur fermé (batch reactor)

Le réacteur reçoit une charge initiale de réactifs. Pendant la réaction , il n'y a pas d'échange de matière avec l'extérieur . Les produits sont extraits en fin d'opération. Le fonctionnement est discontinu (régime transitoire).Le réacteur est donc parfaitement mélangé, en général en phase liquide. La concentration est uniforme dans le réacteur.

Bilan sur le constituant Ai sur le réacteur entier :



E + P = S + Acc

Les termes d'entrée et de sortie sont nuls (pas d'échange de matière avec l'extérieur). Il reste :

Production = Accumulation

$$r_i V = \nu_i r V = \frac{dn_i}{dt}$$

Ecrivons la réaction : A ⟶ P

Si on s'intéresse au réactif-clé A, on peut écrire le bilan par rapport à A, et y faire intervenir la conversion XA.

$$r_A V = \nu_A r V = \frac{dn_A}{dt} \qquad \text{avec : } \nu_A = -1$$

$$-rV = \frac{d(VC_A)}{dt}$$

Si le volume est constant, on peut le sortir de la dérivée, et on retrouve une expression connue :

$$r = \frac{-dC_A}{dt}$$

Si on préfère travailler en conversion, on peut aussi écrire : nA = nA0 (1-XA)

$$-rV = \frac{-n_{A0} dX_A}{dt}$$

Par intégration, on peut calculer le temps permettant d'obtenir une certaine concentration CAF ou une conversion XAF.

$$t = \int_{C_{A0}}^{C_{AF}} -\frac{dC_A}{r} = \frac{n_{A0}}{V} \int_0^{X_{AF}} \frac{dX_A}{r}$$

si V est constant

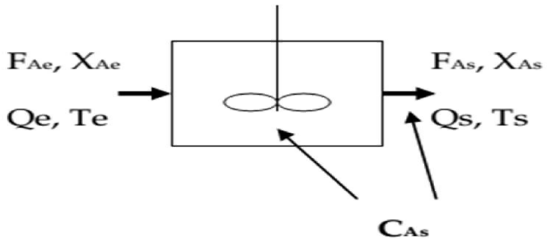
Exemple : cinétique d'ordre 1 $r = kC_A$

$$r = kC_A = \frac{-dC_A}{dt} \quad \text{et} \quad t = \int_{C_{A0}}^{C_{AF}} -\frac{dC_A}{kC_A} = \frac{1}{k} Ln\left(\frac{C_{A0}}{C_{AF}}\right) \quad \text{ou} \quad C_{As} = C_{A0} \exp(-kt)$$

1.2 Réacteur parfaitement agité continu (RPAC)

La concentration est uniforme dans tout le réacteur, égale à la concentration de sortie. On n'a donc que 2 valeurs de concentrations (ou de conversion) : celle d'entrée et celle de sortie.

On fera un bilan sur un constituant sur tout le réacteur.



Le bilan contient des termes d'entrée et sortie, mais pas d'accumulation, car on travaille en régime permanent.

E + P = S

$F_{ie} + \nu_i r V = F_{is}$

On peut écrire le bilan sur A, sur le volume total du réacteur. On détaillera ensuite en fonction des concentrations, ou en fonction de la conversion:

$F_{Ae} + \nu_A r_s V = F_{As}$ r_s est la valeur de la vitesse en sortie de réacteur

$Q_e C_{Ae} + \nu_A r_s V = Q_s C A_s$ avec : $\nu_A = -1$

$$V = \frac{Q(C_{Ae} - C_{As})}{r_s}$$

si Q est le même en entrée et en sortie

$F_{A0}(1- X_{Ae}) - r_s V = F_{A0}(1- X_{As})$

$F_{A0}(X_{As} - X_{Ae}) = r_s V$

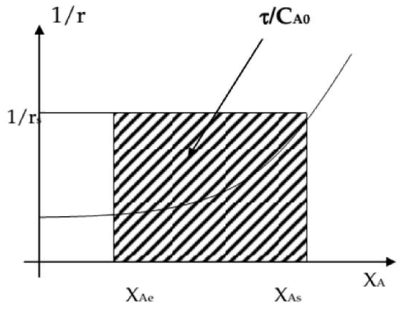


Figure1: Variation de 1/r en fonction du taux de conversion

$$V = \frac{F_{A0}(X_{As} - X_{Ae}))}{r_s}$$

$$\tau = \frac{V}{Q_0} = \frac{C_{A0}(X_{As} - X_{Ae})}{r_s} = \frac{C_{Ae} - C_{As}}{r_s}$$

τ est appelé le temps de passage du réacteur. Il est défini par : $\tau = V/Q_0$

C'est le temps mis pour traiter un volume de réactifs égal au volume du réacteur.

On définit un autre temps **ts**, le temps de séjour moyen du fluide. Ces 2 temps sont égaux si le débit est uniforme dans le réacteur.

Sur la figure1, on a tracé 1/r en fonction de X_A, uniquement à partir de la loi cinétique. L'allure de cette courbe correspond à un ordre positif (r augmentant quand la concentration augmente).

Le tracé du rectangle (égal à □/CA0) traduit le bilan en RPAC.

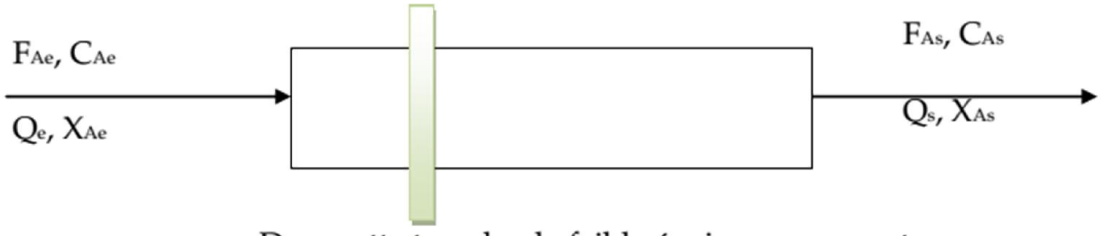
Exemple : cinétique d'ordre 1 $r = kC_A$

$Q_e C_{Ae} + \nu_A r_s V = Q_s C_{As}$
$Q_e C_{Ae} - k C_{As} V = Q_s C_{As}$ et si Q est uniforme,

$$C_{As} = \frac{C_{Ae}}{1 + k\frac{V}{Q}} = \frac{C_{Ae}}{1 + k\tau}$$

1.3 REACTEUR PISTON (RP)

Ici, la concentration est uniforme sur une section de réacteur, mais varie axialement, entre l'entrée et la sortie.



Dans cette tranche de faible épaisseur, on peut
Supposer que les concentrations sont uniformes

En général, XA est nulle en entrée de réacteur. Comme la concentration varie tout le long du réacteur, nous écrivons le bilan sur une tranche de réacteur.

On s'intéresse au régime permanent.

E + P = S

$F_i + \nu_i r\, dV = F_i + dF_i$ F_i et F_i+dF_i sont les flux en entrée et sortie de tranche dV

Ecrivons le bilan sur A sur la tranche dV :

$F_A + \nu_A r\, dV = F_A + dF_A$

$-r\, dV = dF_A$

Soit : $-r\, dV = d(QC_A)$ ou $-r\, dV = -F_{A0}\, d X_A$

$$V=\int_{C_{Ae}}^{C_{As}} \frac{-dQC_A}{r}=F_{A0}\int_{X_{Ae}}^{X_{As}} \frac{dX_A}{r}$$

$$\tau = \frac{V}{Q_0}=C_{A0}\int_{X_{Ae}}^{X_{As}} \frac{dX_A}{r}$$

Même expression qu'en réacteur fermé.

Pour une cinétique d'ordre positif, comme sur la figure2, à conversion donnée, le temps de passage d'un RP est inférieur à celui du RAC (rectangle de hauteur 1/rs). Le RP est donc plus performant que RPAC.

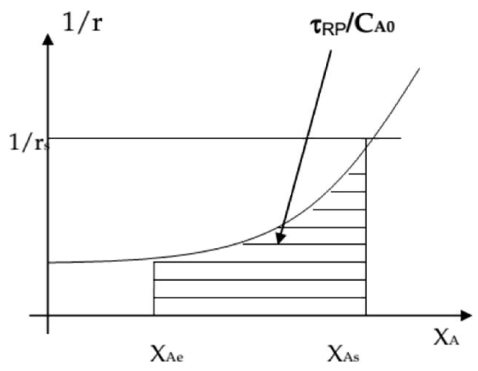


Figure2: Variation de 1/r en fonction du taux de conversion(RP)

Exemple : cinétique d'ordre 1 $r=kC_A$

$-kC_A\, dV = d(QC_A)$ et si Q est uniforme, on obtient l'expression suivante par division sur Q:

$dV/Q = -dC_A/\, kC_A$

$$\tau=\frac{V}{Q}=\frac{1}{k}Ln\frac{C_{Ae}}{C_{As}} \quad \text{ou} \quad C_{As}=C_{Ae}\exp(-k\tau)$$