

## II. Dimensionnement des réacteurs

$$(\text{moles de A consommées}) = (\text{moles de A introduites}) \times \frac{\text{moles de A consommées}}{\text{moles de A introduites}} = (N_{A0}) \cdot X$$

$$(\text{moles A dans réacteur à t}) = (\text{moles A à } t=0) - (\text{moles de A consommées}) = N_{A0} - (N_{A0} \cdot X)$$

⇒ Le nombre de moles de A dans le réacteur au temps t, quand une conversion X est atteinte est :  $N_A = N_{A0}(1-X)$  (E<sub>0</sub>)

E.B.M sur A pour RFPA

$$\frac{dN_A}{dt} = r_A V$$

On veut déterminer le temps pendant lequel on doit laisser les réactifs pour atteindre une certaine conversion → on dérive (E<sub>0</sub>) par rapport au temps.

$$\frac{dN_A}{dt} = 0 - N_{A0} \frac{dx}{dt} \xrightarrow{\text{EBM}} - N_{A0} \frac{dx}{dt} = r_A V$$

$$N_{A0} \frac{dx}{dt} = -r_A V$$

équation caractéristique RFPA sous la forme différentielle

$$t = N_{A0} \int_0^{x(t)} \frac{dx}{-r_A}$$

(temps) t pour atteindre la conversion x dans réacteur de volume V : équation caractéristique RFPA sous la forme intégrale.

ou dérivé  
vitesse de réaction  
Volume réacteur

## II. Dimensionnement des réacteurs

b) Systèmes en flux continu

Temps de séjour

Normalement  $X \geq 0$  si  $t \geq 0$ . Mais pour continu,  $t \geq 0$  quand  $V \geq 0$   
 $\Rightarrow X$  est fonction du volume du réacteur.

$$F_A = F_{A0}(1-X)$$

$F_{A0}$  : flux moléculaire sur lequel A entre dans le système.

$F_A$  : flux moléculaire sur lequel A quitte le système.

$F_{A0} \times X$  : flux moléculaire sur lequel A est consommé dans le système.

ROPAC :

$$\text{E.B.M. sur A : } V = \frac{F_{A0} - F_A}{-r_A} \xrightarrow{\text{E}_1} V = \frac{F_{A0} \times X}{-r_A}$$

$$V = \frac{F_{A0} X}{(-r_A) \text{ sortie}}$$

volume V de réacteur ROPAC pour atteindre conversion X.  
équation caractéristique ROPAC.

parfaitement agité  $\Rightarrow$  composition dans le réacteur = composition de sortie

$\Rightarrow$  la vitesse de réaction est évaluée dans les conditions de sortie

## II. Dimensionnement des réacteurs

REP :

$$\text{E.B.M. sur A : } -\frac{dF_A}{dV} = -r_A \xrightarrow{E_1} +\frac{dF_A}{dV} = 0 - F_{A0} \frac{dX}{dV}$$

$$F_{A0} \frac{dX}{dV} = -r_A$$

équation caractéristique REP sous la forme différentielle



on sépare les variables en intégrant avec  $V = 0$  quand  $X = 0$

$$V = F_{A0} \int_0^X \left( \frac{dX}{-r_A} \right)$$

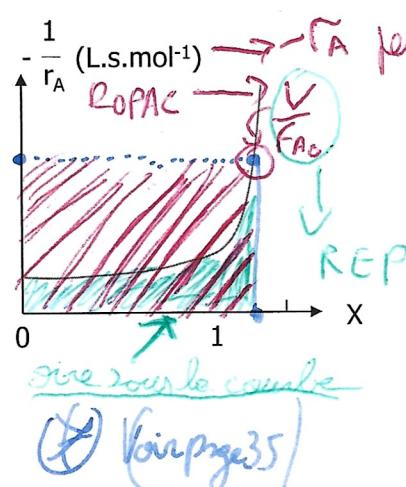
volume  $V$  de réacteur REP pour atteindre une conversion  $X$  :  
équation caractéristique REP sous la forme intégrale

Analogie avec le RFPA où  $V \rightarrow t$  et  $F_{A0} \rightarrow N_{A0}$

## II. Dimensionnement des réacteurs

### 3) Application des équations caractéristiques

La vitesse de disparition de A,  $-r_A$ , est presque toujours fonction des concentrations des différentes espèces présentes. Quand une seule réaction a lieu, chaque concentration peut être exprimée en fonction de la conversion.



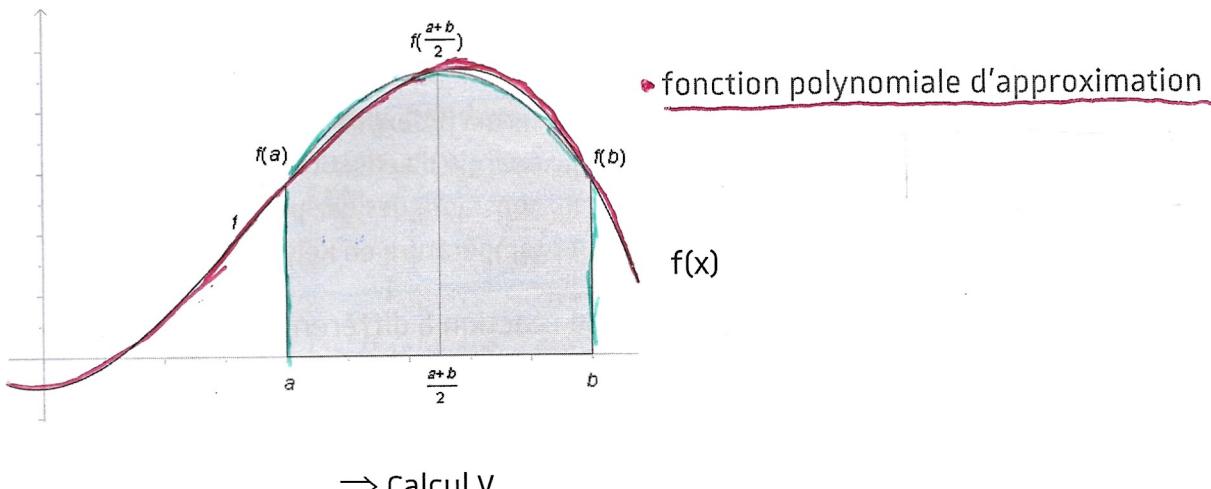
- $\frac{1}{r_A}$  peut être exprimé comme une fonction de x
- la majorité des réactions est barrée par le type de courbe réactions d'ordre > 0.
- Si réaction isotherme :
    - $r_A$  élevée quand la concentration des réactifs est élevée donc à faible conversion :  
-  $1/r_A$  faible à X faible.
    - $r_A$  faible quand la concentration des réactifs, forte conversion :  
-  $1/r_A$  élevée à X élevé
  - Pour réaction irréversible d'ordre > 0 :  $\frac{1}{r_A} \rightarrow$

## II. Dimensionnement des réacteurs

### Méthode de Simpson

Technique numérique de calcul approché d'une intégrale

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{6} \left[ f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right] \Rightarrow \text{Calcul } V_{\text{REP}}$$

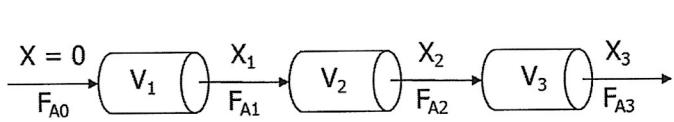


## II. Dimensionnement des réacteurs

### 4) Réacteurs en série

Les réacteurs (ouverts !) sont souvent montés en série

→ le flux de sortie de l'un est le flux d'alimentation du suivant.



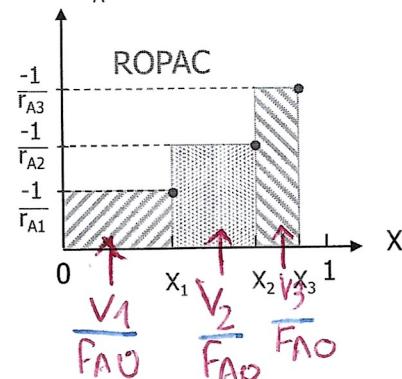
$$\left. \begin{aligned} F_{A1} &= F_{A0} (1 - X_1) \\ F_{A2} &= F_{A0} (1 - X_2) \\ F_{A3} &= F_{A0} (1 - X_3) \end{aligned} \right\}$$

tout est défini par rapport au 1<sup>er</sup> réacteur

Bilan matière sur le réacteur du milieu :

entrant + production = sortant

$$F_{A1} + \frac{1}{r_A} (L.s.mol^{-1}) = F_{A2}$$

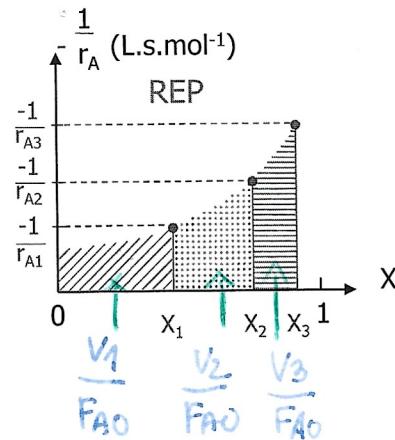


ROPAC :

$$V_2 = \frac{F_{A0}(X_2 - X_1)}{-r_A}$$

REP :

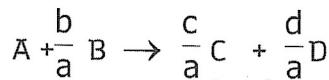
$$V_2 = F_{A0} \int_{X_1}^{X_2} \frac{r_A}{dx} dX$$



### III. Lois de vitesse

Leur connaissance est nécessaire pour le dimensionnement des réacteurs.

#### 1) Définitions



Loi de vitesse :

$$-r_A = k(T) f(C_A, C_B, \dots)$$

→ équation algébrique reliant  $-r_A$  et concentration.

→  $k$  : constante de vitesse, dépend de la température.

On postule que  $k$  ne dépend que de la température.

(Ceci pour la plupart des réactions, mais pas dépendre de la pression, du solvant, du catalyseur).

$$k(T) = A e^{-E/RT}$$

loi d'Arrhénius

A : terme préexponentiel

E : énergie d'activation (J.mol<sup>-1</sup>)

R : constante des gaz parfaits (8,314 J.mol<sup>-1</sup>.K<sup>-1</sup>)

T : température en Kelvin

E est déterminée expérimentalement en faisant la réaction à différentes températures :

$$\ln k = \ln A - \frac{E}{R} \left( \frac{1}{T} \right)$$

→ équation de droite  $\ln k = f(1/T)$

→ pente donnée E

### III. Lois de vitesse

#### • Loi de vitesse

$$-r_A = k C_A^a C_B^b$$

$\left\{ \begin{array}{l} \text{réaction d'ordre } a \text{ par rapport à } A \\ \text{réaction d'ordre } b \text{ par rapport à } B \\ \text{ordre global de la réaction : } n = a + b \end{array} \right.$

on n'est pas forcément à nombre entier :  $CO + Cl_2 \rightarrow COCl_2$  (phosgène)

$$-r_{CO} = k C_{CO} C_{Cl_2}^{3/2} \text{ ordre } n = 5/2$$

l'unité de k dépend de l'ordre de la réaction :

ordre 0 :  $-r_A = k$

ordre 1 :  $-r_A = k C_A$

ordre 2 :  $-r_A = k C_A^2$  ou  $k C_A C_B$

ordre 3 :  $-r_A = k C_A^3$  ou  $k C_A^2 C_B$  ou  $C_A C_B^2 \dots$

0	$k : mol \cdot L^{-1} \cdot s^{-1}$
1	$k : s^{-1}$
2	$k : L \cdot mol^{-1} \cdot s^{-1}$
3	$k : L^2 \cdot mol^{-2} \cdot s^{-1}$

E, A et n peuvent être trouvés dans la littérature pour un grand nombre de réactions en phase gaz et en phase liquide.

#### • Réaction élémentaire

réaction pour laquelle l'ordre de réaction de chaque espèce est identique

à son coefficient stochiométrique

