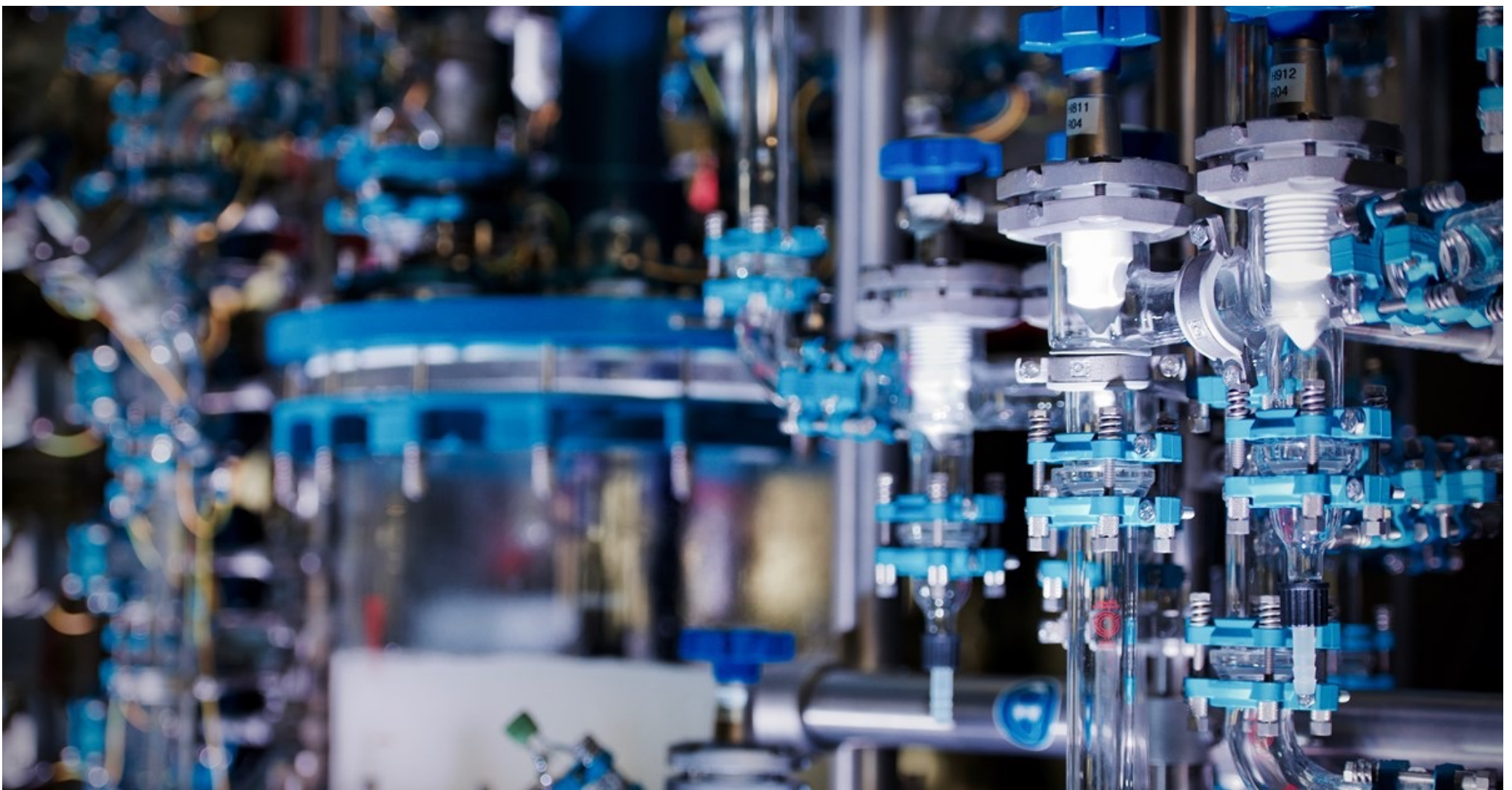


Génie de la réaction chimique

Dr. Thierry Chappuis



Cours 10

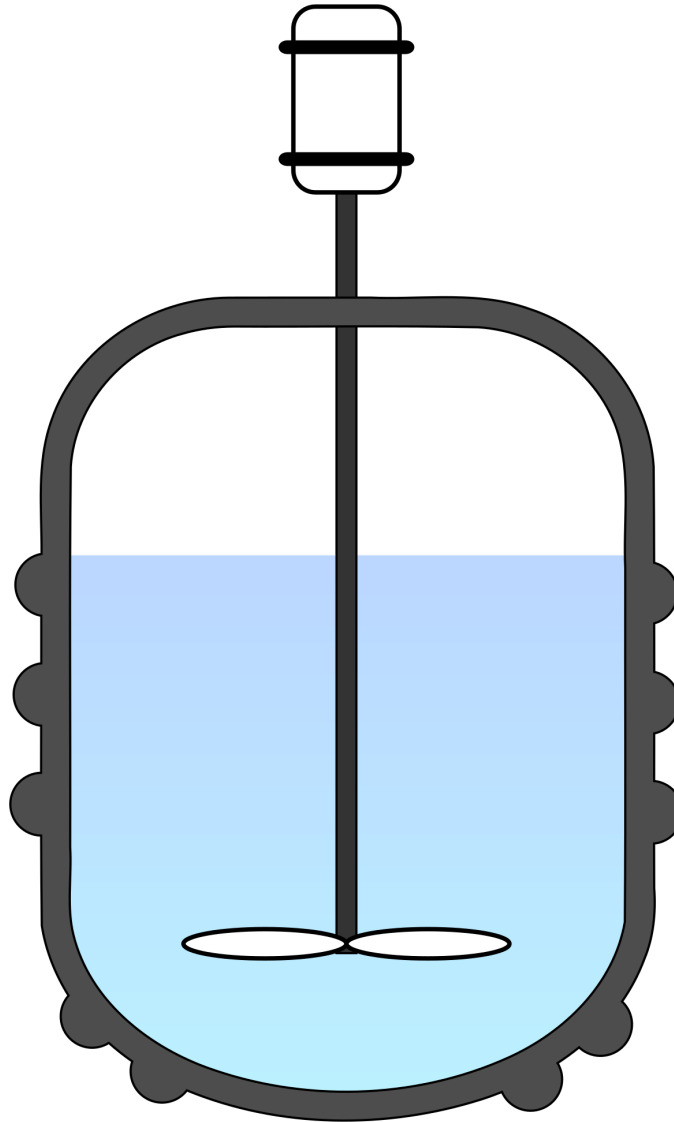
Modélisation et conception de réacteurs non isothermes à l'état transitoire

Objectif

Dans ce chapitre, vous allez donc apprendre à:

- **Développer** un bilan d'énergie thermique pour différents types de réacteurs non stationnaires.
- **Résoudre** des systèmes d'équations couplant bilans de matière et bilan d'énergie.
- **Dimensionner** des réacteurs chimiques batch et fed-batch en tenant compte des effets de température

Le bilan de chaleur à l'état transitoire



Le bilan de chaleur à l'état transitoire

$$\frac{d\hat{E}_{sys}}{dt} = \frac{dU}{dt} = \sum_i (\bar{C}_{p_{réacteur}} + N_i c_{p_i}) \frac{dT}{dt} = \dot{Q}_{RX} + \dot{Q}_{feed} + \dot{Q}_{EX}$$

\dot{Q}_{RX} est l'énergie liée à la réaction chimique

\dot{Q}_{EX} est l'énergie liée à l'échange thermique avec un caloporteur

\dot{Q}_{feed} est l'énergie liée au dosage de matière

$\bar{C}_{p_{réacteur}}$ est la capacité calorifique du réacteur lui-même

Le bilan de chaleur à l'état transitoire

$$\frac{d\hat{E}_{sys}}{dt} = \frac{dH_{sys}}{dt} = \sum_i (\bar{C}_{p_{réacteur}} + N_i c_{p_i}) \frac{dT}{dt} = \dot{Q}_{RX} + \dot{Q}_{feed} + \dot{Q}_{EX}$$

$$\dot{Q}_{RX} \text{ vaut } \sum_j (-\Delta H_{R_j}) \cdot r_j \cdot V$$

$$\dot{Q}_{EX} \text{ vaut } U \cdot A \cdot (T_j - T)$$

$$\dot{Q}_{feed} \text{ vaut } \sum_i F_{i0} \cdot c_{p_i} \cdot (T_0 - T)$$

Pour un réacteur batch avec un mélange non visqueux

$$\frac{dN_i}{dt} = R_i V$$

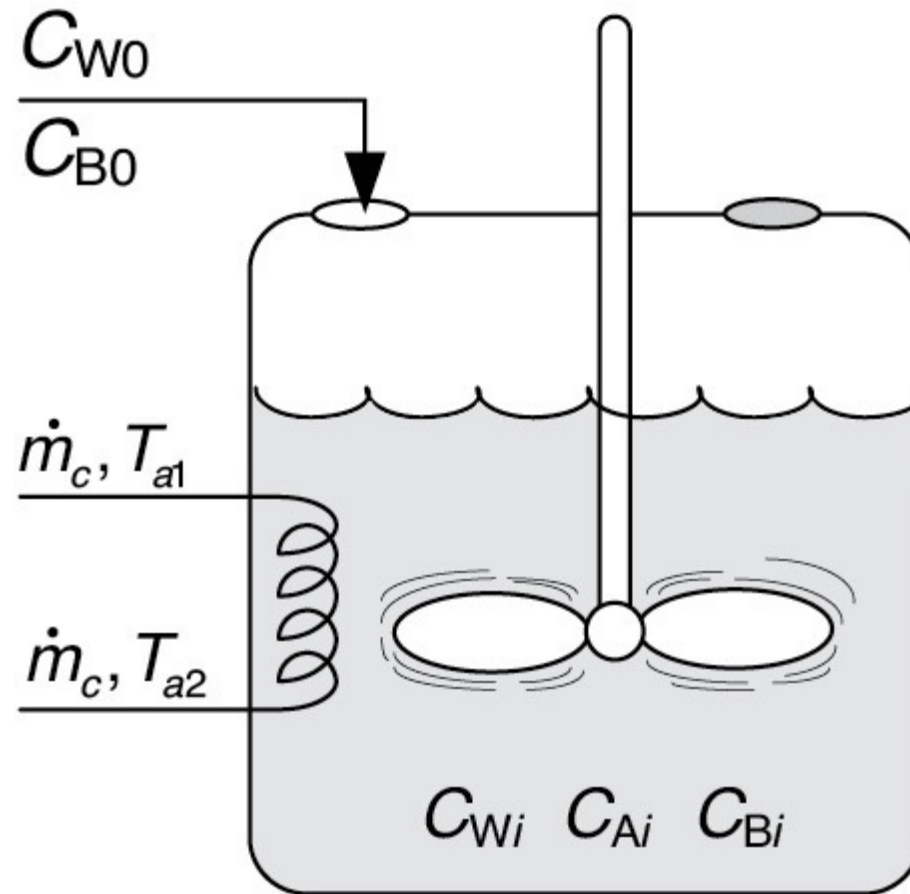
$$\frac{dT}{dt} = \frac{U \cdot A \cdot (T_j - T) + \sum_j (-\Delta H_{R_j}) \cdot r_j V}{\sum_i N_i \cdot c_{p_i}}$$

Démarrage d'un réacteur CSTR

$$\frac{dN_i}{dt} = F_{i0} - F_i + R_i V$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{U \cdot A \cdot (T_j - T) + \sum_i F_{i0} \cdot c_{p_i} \cdot (T_0 - T) + \sum_j (-\Delta H_{R_j}) \cdot r_j V}{\sum_i N_i \cdot c_{p_i}}$$

Bilan de chaleur sur un réacteur fed-batch



Bilan de chaleur sur un réacteur fed-batch

$$\frac{dN_i}{dt} = F_{i0} + R_i V$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{U \cdot A \cdot (T_j - T) + \sum_i F_{i0} \cdot c_{p_i} \cdot (T_0 - T) + \sum_j (-\Delta H_{R_j}) \cdot r_j V}{\sum_i N_i \cdot c_{p_i}}$$

Bilan de chaleur sur un réacteur fed-batch

$$\frac{dN_i}{dt} = F_{i0} + R_i V$$

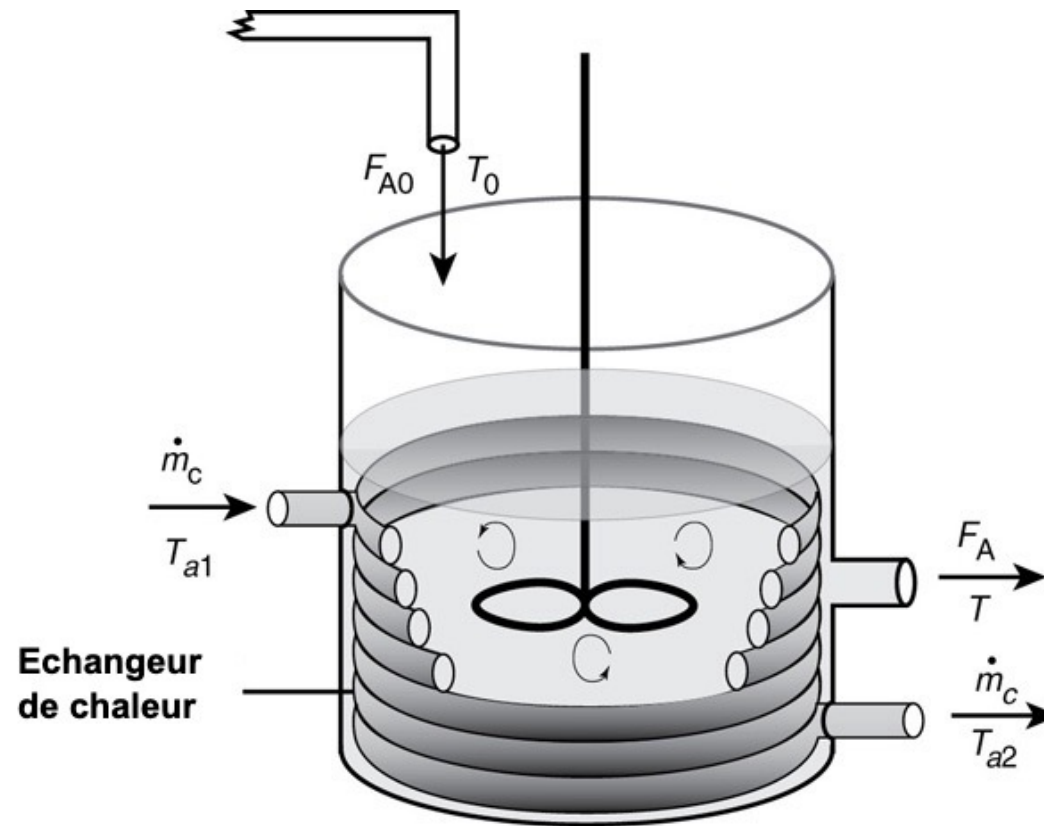
$$\frac{dT}{dt} = \frac{U \cdot A \cdot (T_j - T) + \sum_i F_{i0} \cdot c_{p_i} \cdot (T_0 - T) + \sum_j (-\Delta H_{R_j}) \cdot r_j V}{\sum_i N_i \cdot c_{p_i}}$$

Dans un fed-batch, V et A varient avec le temps !

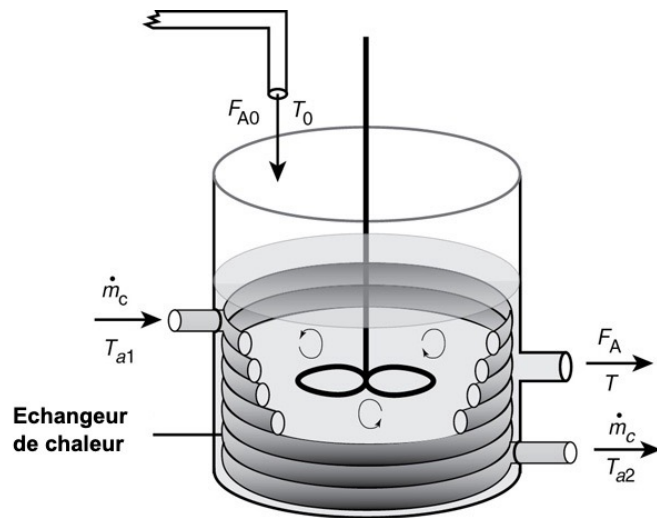
$$\frac{dN_i}{dt} = F_{i0} - F_i + R_i V(t)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{U \cdot A(t) \cdot (T_j - T) + \sum_i F_{i0} \cdot c_{p_i} \cdot (T_0 - T) + \sum_j (-\Delta H_{R_j}) \cdot r_j \cdot V(t)}{\sum_i N_i \cdot c_{p_i}}$$

Si la température du caloporteur varie ?



Si la température du caloporteur varie ?



$$\dot{Q}_{EX} = \dot{m}_c c_{p_c} (T_{a1} - T) \cdot \left(1 - \exp\left(-\frac{UA}{\dot{m}_c c_{p_c}}\right) \right)$$

$$T_{a2} = T + (T - T_{a1}) \cdot \exp\left(-\frac{UA}{\dot{m}_c c_{p_c}}\right)$$