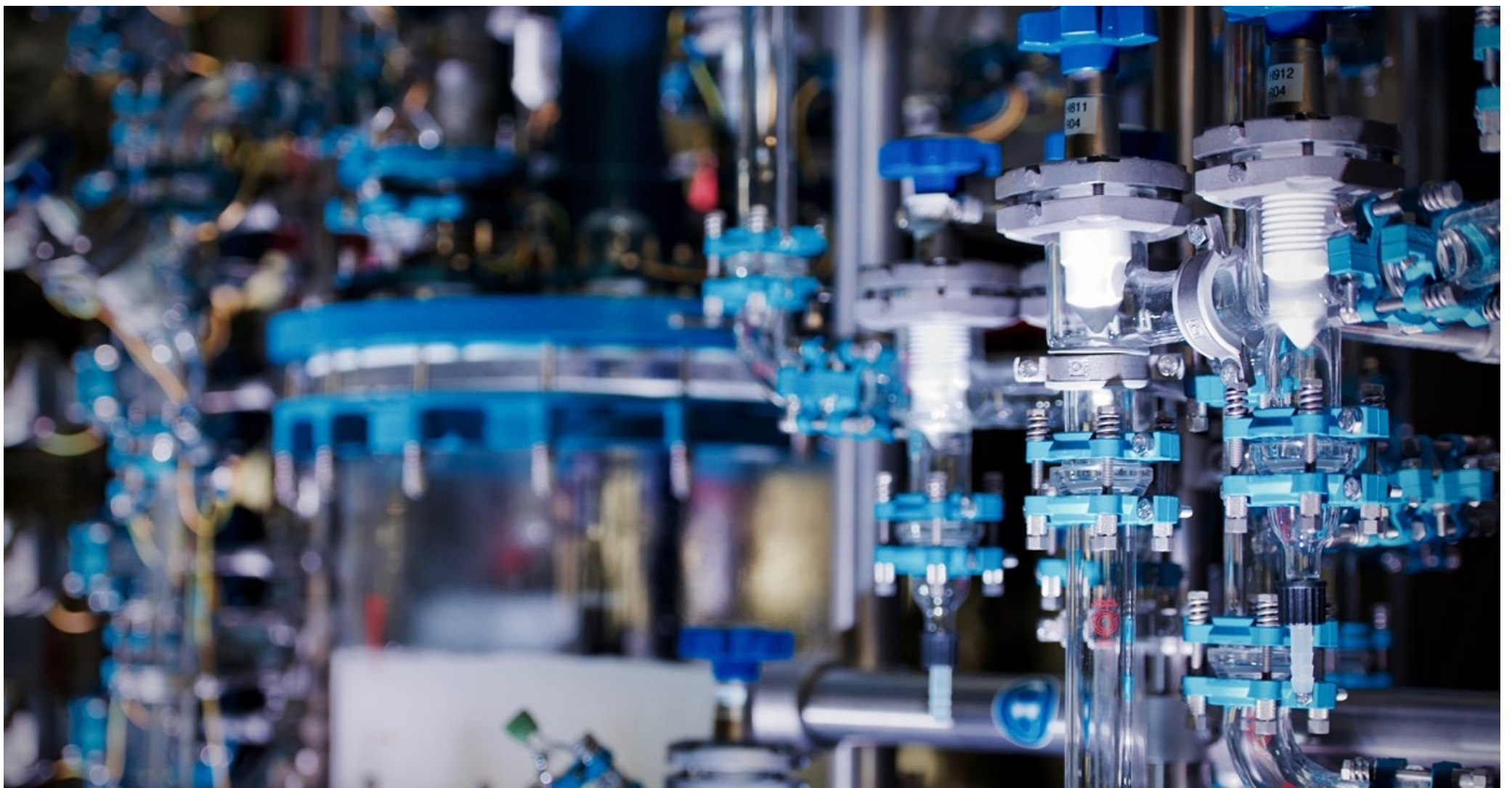


# **Génie de la réaction chimique**

**Dr. Thierry Chappuis**





## Cours 4

### **Conversion et optimisation**

# Objectifs

Dans le chapitre 3 de ce cours, vous avez appris à écrire un **bilan de matière** pour chacun des types principaux de réacteurs chimiques.

Dans le chapitre 4, vous allez apprendre comment **dimensionner et arranger** ces réacteurs pour obtenir un taux de conversion prédéterminé.

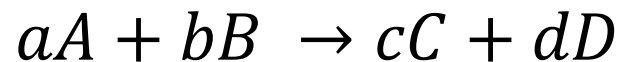
# Objectifs

Dans ce chapitre, vous allez donc apprendre:

- À écrire les équations de bilan des quatre types de réacteurs en fonction du taux de conversion.
- À dimensionner chaque type de réacteur à l'aide de la relation  $-R_A = f(X)$ .
- À comparer les dimensions des réacteurs CSTR et tubulaires.
- À décider du meilleur arrangement de réacteurs en série.

## Définition de la conversion (rappel)

Soit la réaction modèle générique suivante:



On définit le taux de conversion comme:

$$X = \frac{\text{Moles de A ayant réagit}}{\text{Moles de A investies}} = \frac{N_{A0} - N_A}{N_{A0}}$$

# Conception d'un réacteur batch

Le bilan molaire sur le réactif A dans un réacteur batch s'écrit de la manière suivante:

$$\frac{dN_A}{dt} = R_A \cdot V$$

Avec  $N_A = N_{A0}(1 - X)$ , il vient:

$$\frac{dN_A}{dt} = 0 - N_{A0} \cdot \frac{dX}{dt}$$

Et donc

$$N_{A0} \cdot \frac{dX}{dt} = -R_A \cdot V$$

# Conception d'un réacteur batch

Le temps de réaction est ainsi donné par:

$$t_R = \int_0^{t_R} dt = N_{A0} \cdot \int_{X_0}^{X_S} \frac{dX}{-R_A V}$$

# Conception d'un réacteur CSTR

Le volume du réacteur pour achever une conversion préalablement spécifiée est donné par la relation:

$$V = \frac{F_{A0} \cdot X}{-R_A}$$



# Conception d'un réacteur tubulaire

Le bilan molaire sur le réactif A dans un réacteur tubulaire s'écrit de la manière suivante:

$$\frac{dF_A}{dV} = R_A$$

Avec  $F_A = F_{A0} - F_{A0} \cdot X$ , il vient:

$$\frac{dF_A}{dV} = 0 - F_{A0} \cdot \frac{dX}{dV}$$

Et donc:

$$F_{A0} \cdot \frac{dX}{dV} = -R_A$$

# Conception d'un réacteur tubulaire

Le volume du réacteur pour achever une conversion préalablement spécifiée est donné par la relation:

$$V = F_{A0} \int_{X_0}^{X_s} \frac{dX}{-R_A}$$

# Conception d'un réacteur tubulaire à lit fixe

Le bilan molaire sur le réactif A dans un réacteur tubulaire s'écrit de la manière suivante, en terme de taux de conversion:

$$F_{A0} \cdot \frac{dX}{dW} = -R'_A$$

# Conception d'un réacteur tubulaire à lit fixe

En l'absence de perte de charge, il est possible de trouver la masse de catalyseur nécessaire pour obtenir une conversion préalablement spécifiée:

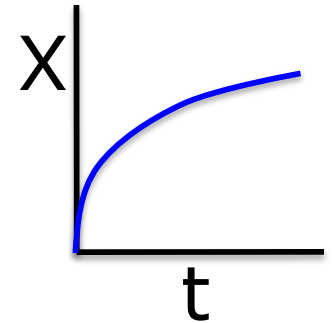
$$W = F_{A0} \cdot \int_{X_0}^{X_s} \frac{dX}{-R'_A}$$

# Bilans de matière en termes de conversion

Réacteur    Différentielle    Algébrique    Intégrale

**Batch**     $N_{A0} \frac{dX}{dt} = -R_A V$

$$t = N_{A0} \int_0^X \frac{dX}{-R_A V}$$



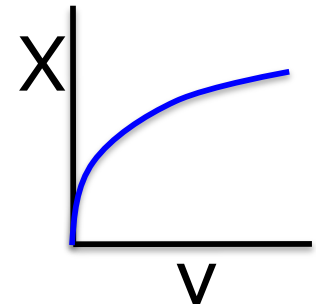
**CSTR**

$$V = \frac{F_{A0} X}{-R_A}$$

**PFR**

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

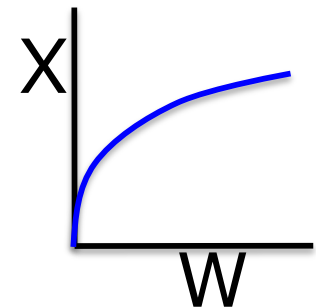
$$V = F_{A0} \int_0^X \frac{dX}{-R_A}$$



**PBR**

$$F_{A0} \frac{dX}{dW} = -R'_A$$

$$W = F_{A0} \int_0^X \frac{dX}{-R'_A}$$



# Les diagrammes de Levenspiel

Lorsque la vitesse de transformation  $R_A$  d'un réactif est connue en fonction de la conversion, on peut dimensionner le réacteur en utilisant un **diagramme de Levenspiel**.

Il s'agit de tracer le graphe:

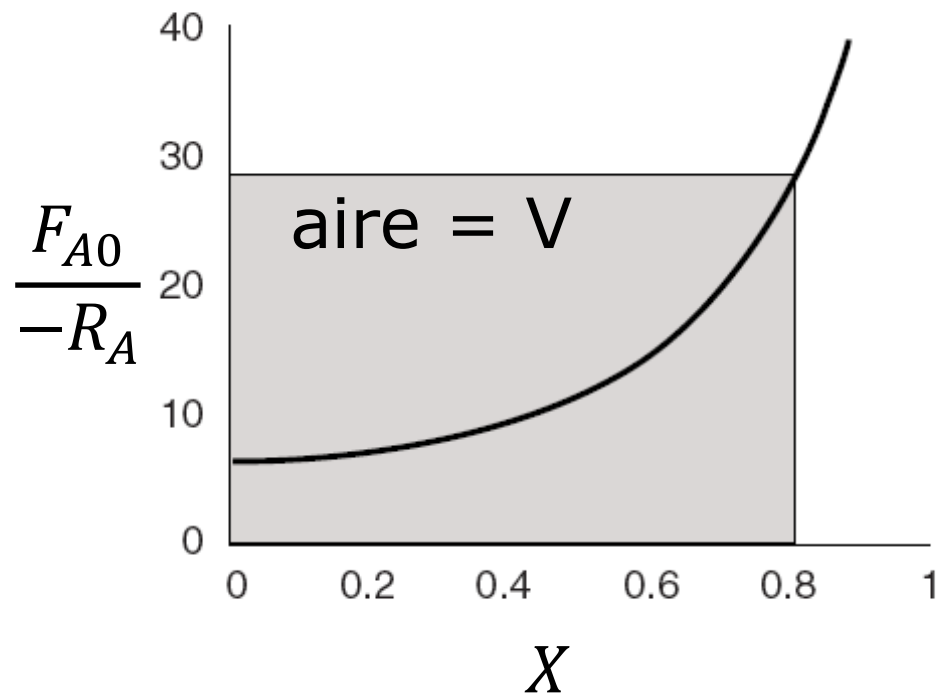
$$\frac{F_{A0}}{-R_A} = f(X)$$



# Les diagrammes de Levenspiel: Trouver V

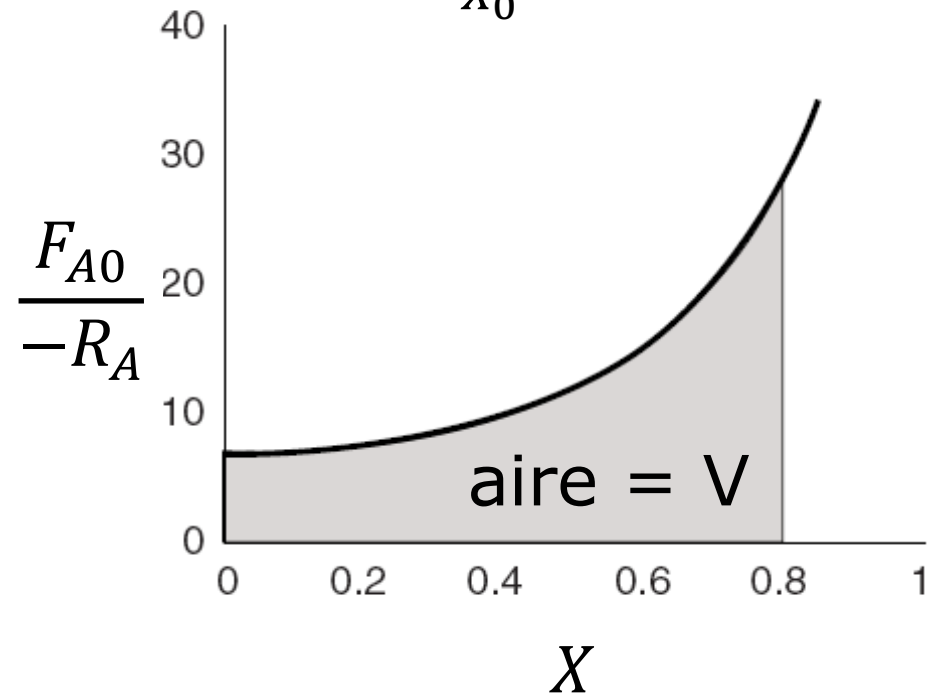
## Réacteur CSTR

$$V = \frac{F_{A0}}{-R_A} \cdot X$$



## Réacteur PFR

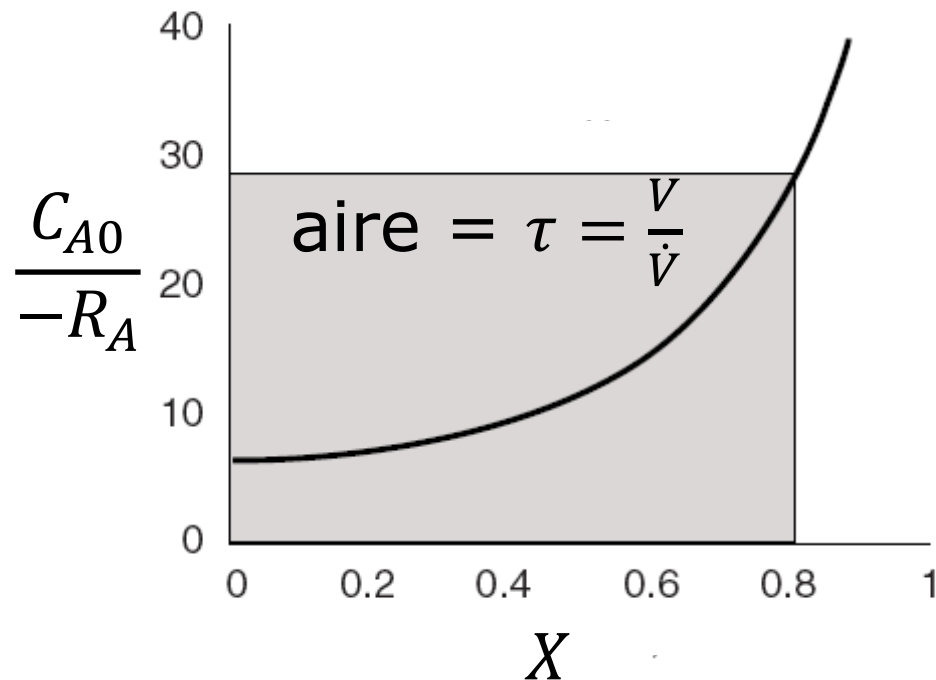
$$V = \int_{X_0}^{X_f} \frac{F_{A0}}{-R_A} \cdot dX$$



# Les diagrammes de Levenspiel: Trouver $\tau$

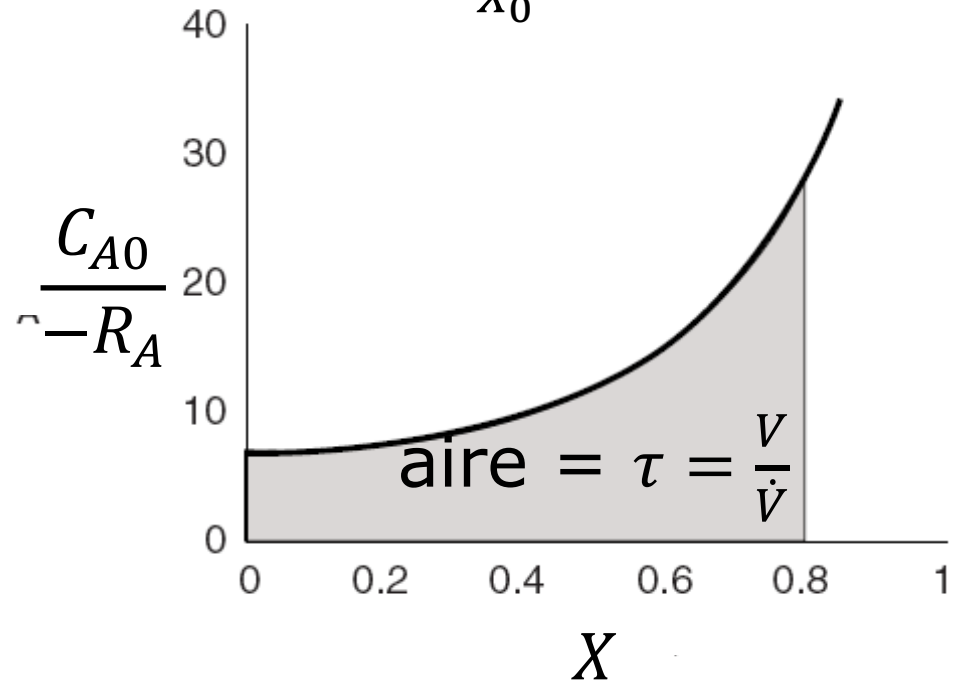
## Réacteur CSTR

$$\tau = \frac{C_{A0}}{-R_A} \cdot X$$



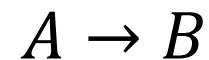
## Réacteur PFR

$$\tau = \int_{X_0}^{X_f} \frac{C_{A0}}{-R_A} \cdot dX$$



## Exercice 4.1

On considère la réaction d'isomérisation en phase gazeuse suivante, réalisée en conditions isothermes:



La réaction est d'abord réalisée en laboratoire à une température de 500 K et une pression de 830 kPa avec un réacteur initialement chargé avec du A pur. Le débit molaire de A entrant est de  $F_{A0} = 0.4 \text{ mol/s}$ .

## Exemple 4.1

Les données obtenues au laboratoire sont:

$X (-)$	$-R_A$ (mol/m <sup>3</sup> .s)
0	0.45
0.1	0.37
0.2	0.30
0.4	0.195
0.6	0.113
0.7	0.079
0.8	0.05

## Exemple 4.1

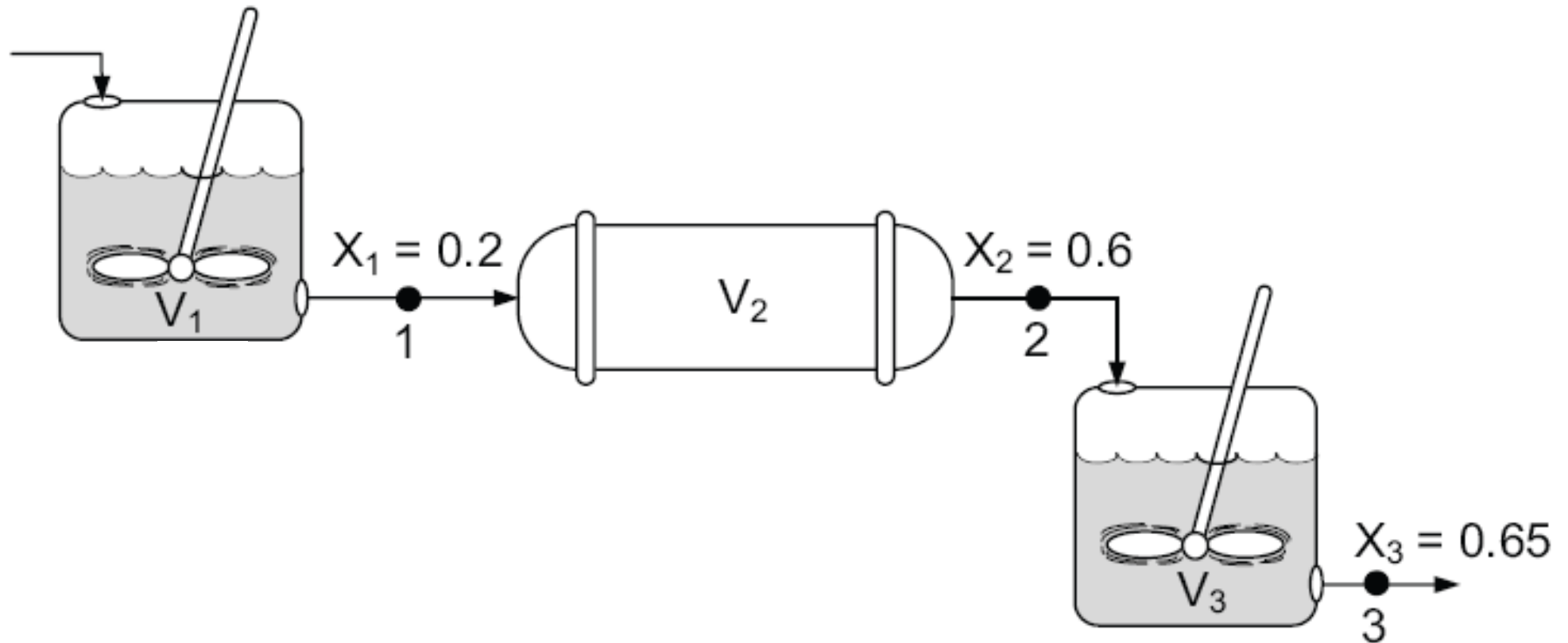
Dans un réacteur CSTR:

- Calculer le volume nécessaire pour obtenir une conversion de 80 %.

Dans un réacteur tubulaire:

- Calculer le volume nécessaire pour obtenir une conversion de 80 %.
- Tracer un profil de la conversion en fonction de la position dans le réacteur.
- Comparer les deux types de réacteurs.

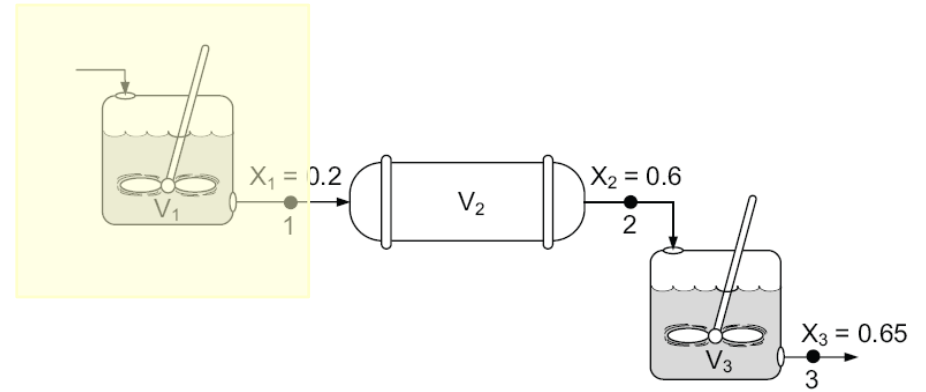
# Les réacteurs en série



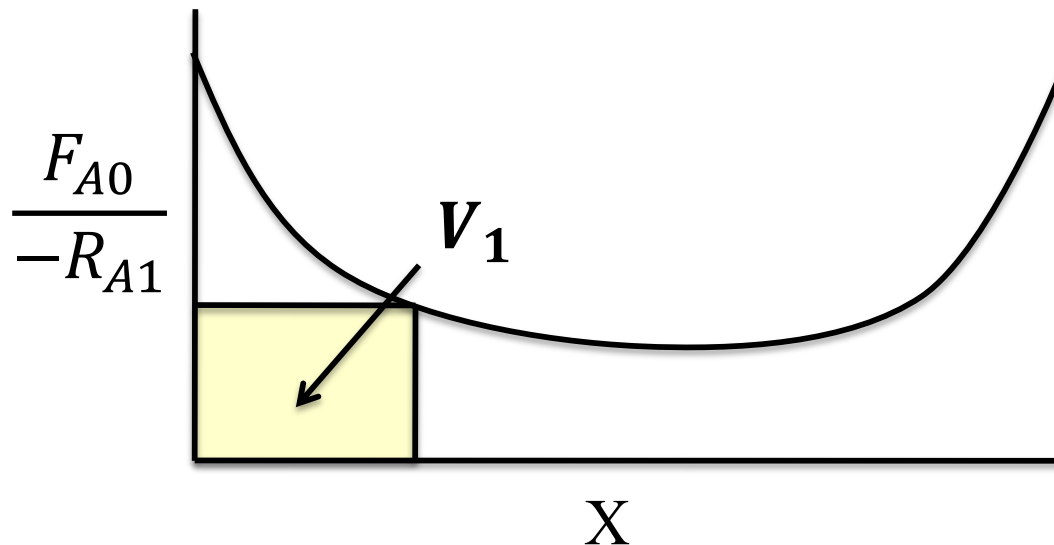


# Les réacteurs en série

Dans le réacteur 1:

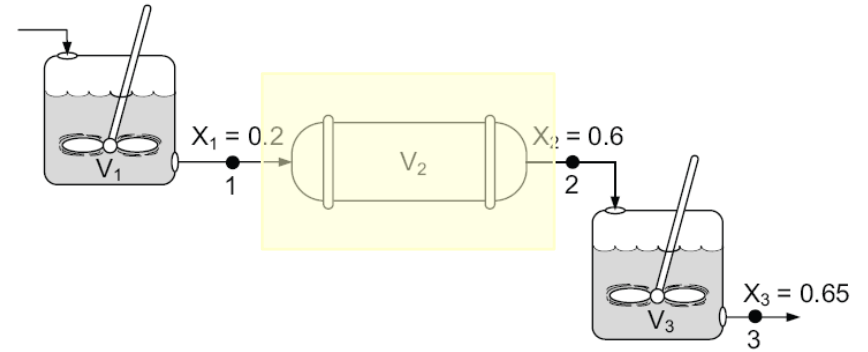


$$V_1 = \frac{F_{A0} - F_{A1}}{-R_{A1}} = \frac{F_{A0} \cdot X_1}{-R_{A1}}$$

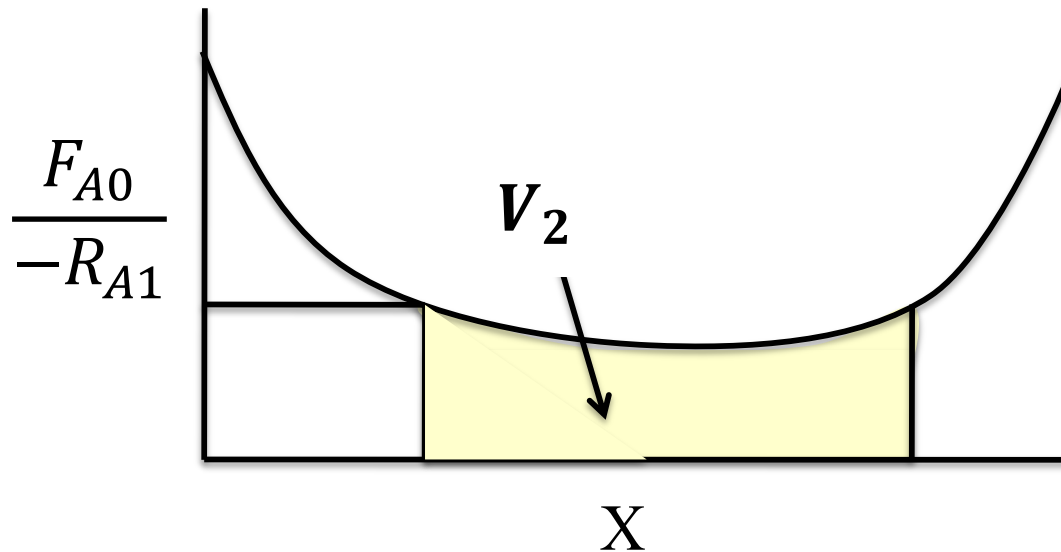


# Les réacteurs en série

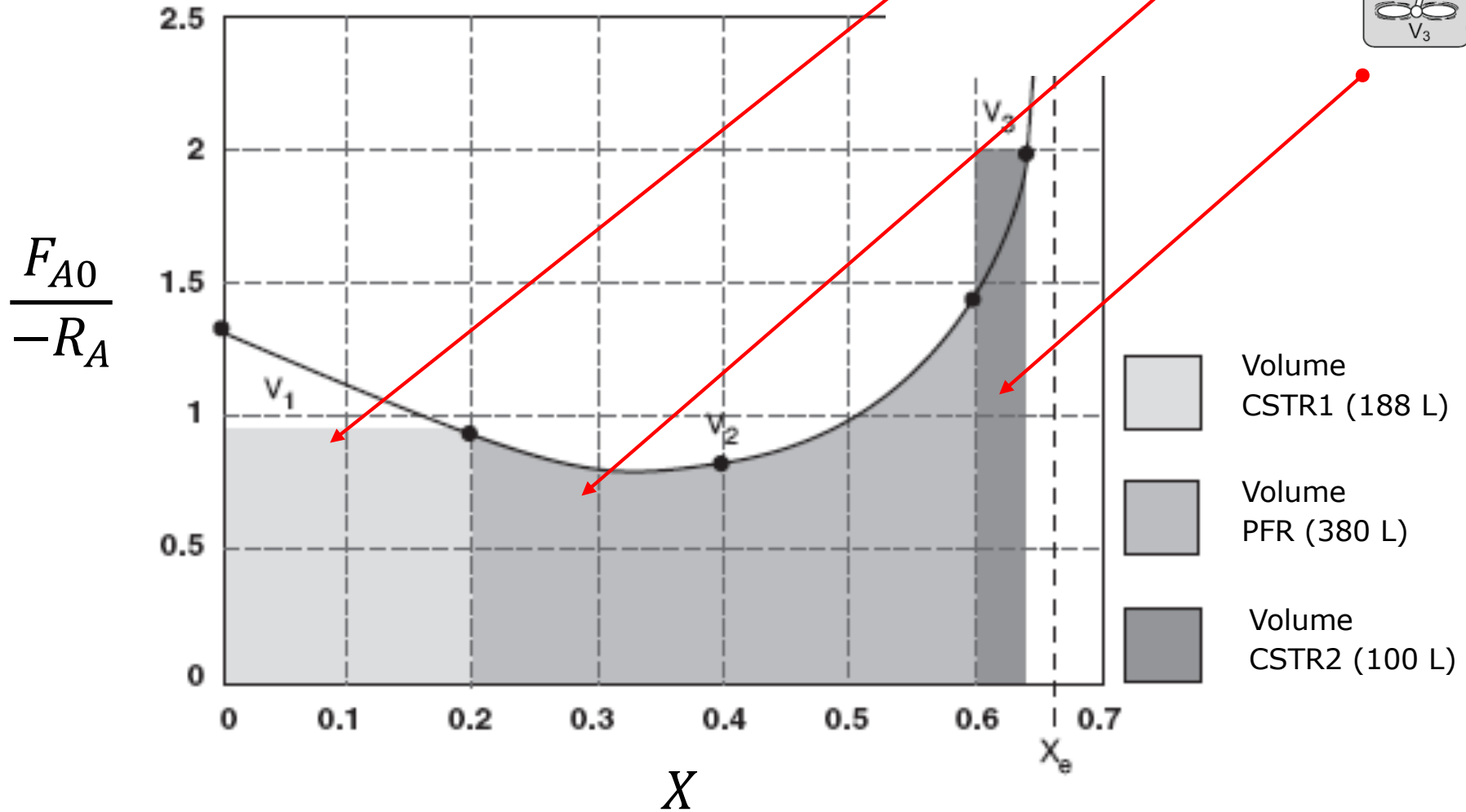
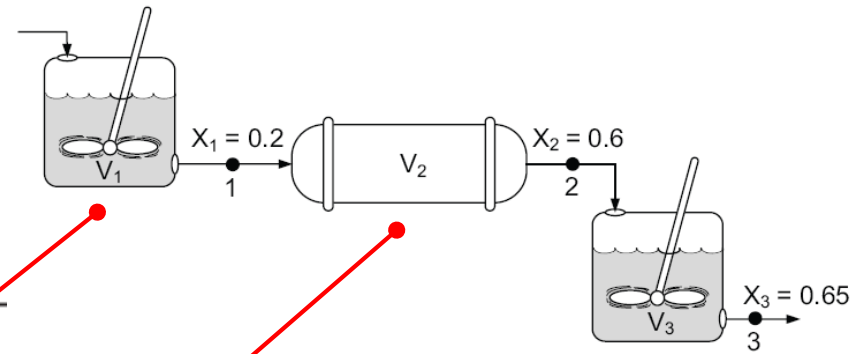
Dans le réacteur 2:



$$V_2 = \int_{X_1}^{X_2} \frac{F_{A0}}{-R_A} dX$$



# Les réacteurs en série



## Exemple 4.2

On considère la réaction exothermique suivante:



Cette réaction est effectuée dans un réacteur adiabatique et les données suivantes sont enregistrées:

$X$	0	0.2	0.4	0.45	0.5	0.6	0.8	0.9
$R_A$ (mol/L*min)	-1.0	-1.67	-5.0	-10.0	-15.0	-4.0	-1.25	-0.91

Le débit molaire de A entrant dans le réacteur est de 300 mol/min.

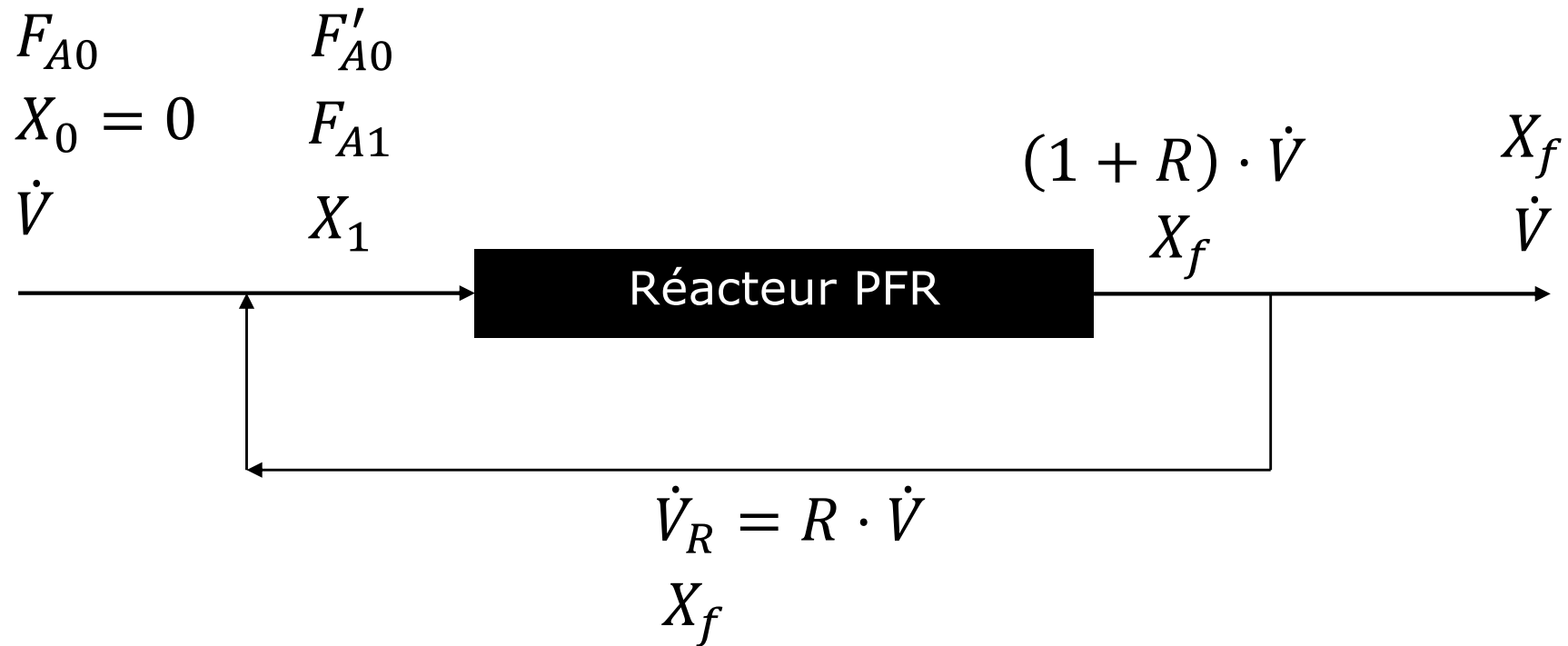
## Exemple 4.2

Calculer le volume nécessaire pour réaliser une conversion de 90 % dans:

- Un arrangement optimal de réacteurs CSTRs et PFRs
- Un réacteur PFR à recyclage avec un taux de recyclage optimal

$$R = \frac{\dot{V}_R}{\dot{V}} := \text{taux de recyclage}$$

## Le réacteur PFR à recyclage

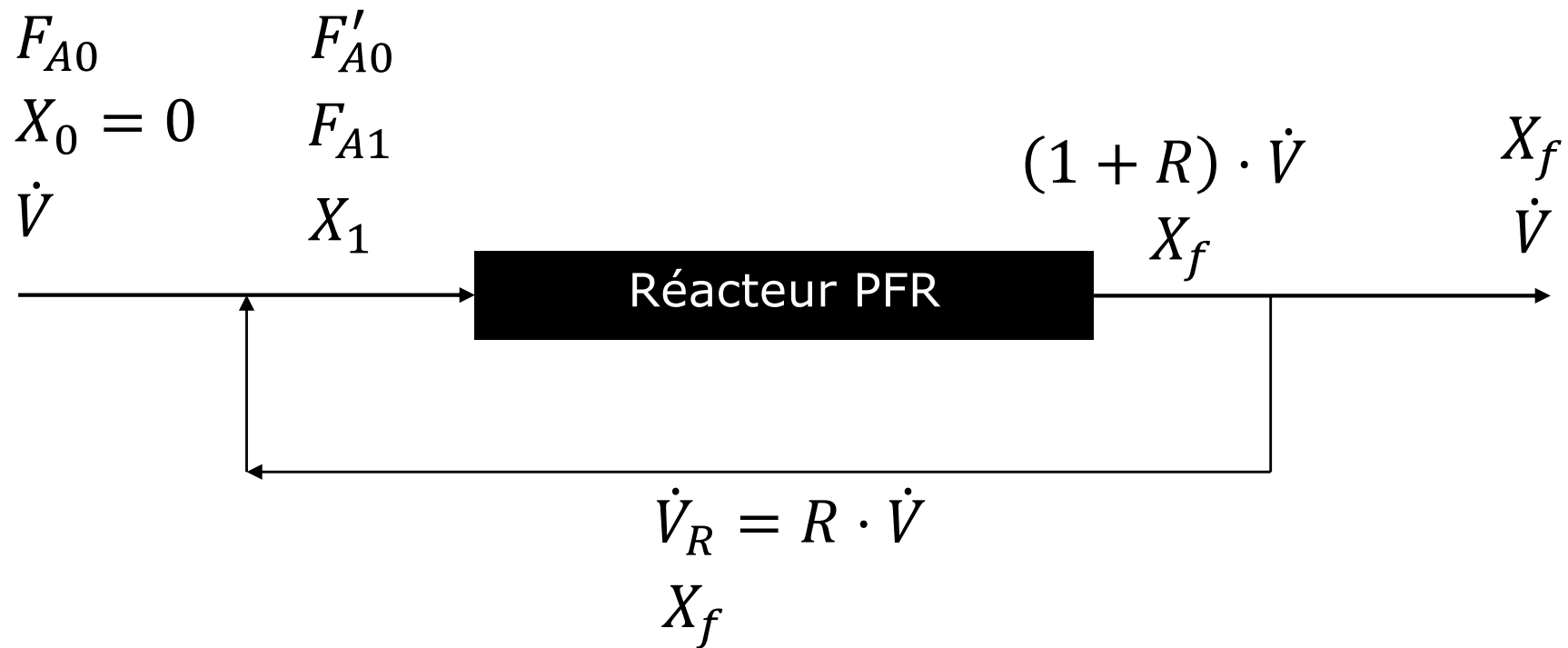


$$V = \int_{X_1}^{X_f} \frac{F'_{A0}}{-R_A} dX = (1 + R) \cdot \int_{X_1}^{X_f} \frac{F_{A0}}{-R_A} dX \text{ avec } F'_{A0} = (1 + R) \cdot F_{A0}$$



$$R = \frac{\dot{V}_R}{\dot{V}} := \text{taux de recyclage}$$

## Le réacteur PFR à recyclage



$$V = (1 + R) \cdot \int_{X_1}^{X_f} \frac{F_{A0}}{-R_A} dX \text{ avec } X_1 = \frac{R}{1+R} X_f$$