7.3. Procédés industriels continus : aspects cinétiques et thermodynamiques	
D'un protocole de laboratoire à un procédé industriel	
Opérations unitaires d'un procédé.	Exploiter un schéma de procédé légendé pour identifier les différentes opérations unitaires.
Procédés discontinus ou continus.	Identifier un procédé discontinu ou continu.
Procédés continus en régime stationnaire : débit de matière en masse et en quantité de matière, bilan de matière.	Effectuer un bilan de matière sur une espère chimique à partir de données sur les compositions et les débits entrants et sortants.
Cinétique de transformations en réacteur ouvert.	
Modèle du réacteur parfaitement agité continu en régime stationnaire dans le cas d'un écoulement de débits volumiques égaux à l'entrée et à la sortie.	Effectuer un bilan de quantité de matière sur une espèce chimique.
Taux de conversion d'un réactif. Temps de passage.	Relier le taux de conversion du réactif au temps de passage pour une transformation de loi de vitesse de réaction donnée.
Modèle du réacteur chimique en écoulement piston isotherme en régime stationnaire dans le cas de débits volumiques égaux à l'entrée et à la sortie du réacteur ; dimensionnement d'un réacteur en écoulement piston.	Établir un bilan de quantité de matière sur une espèce chimique. Relier le taux de conversion en sortie d'un réacteur en écoulement piston et le temps de passage pour une transformation modélisée par une loi de vitesse donnée.
Étude thermique d'un réacteur ouvert.	
Bilan énergétique sur un réacteur parfaitement agité continu en régime stationnaire dans le cas de débits volumiques égaux à l'entrée et à la sortie.	Effectuer un bilan énergétique sur un réacteur ouvert afin d'établir une relation entre les températures d'entrée et de sortie, le taux de conversion et le flux thermique éventuellement échangé. 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 ouvert siège d'une transformation modélisée par une réaction isotherme unique et en discuter la stabilité.

Révisions de première année 1er semestre

1.2 Évolution temporelle d'un système, siège d'une transformation chimique

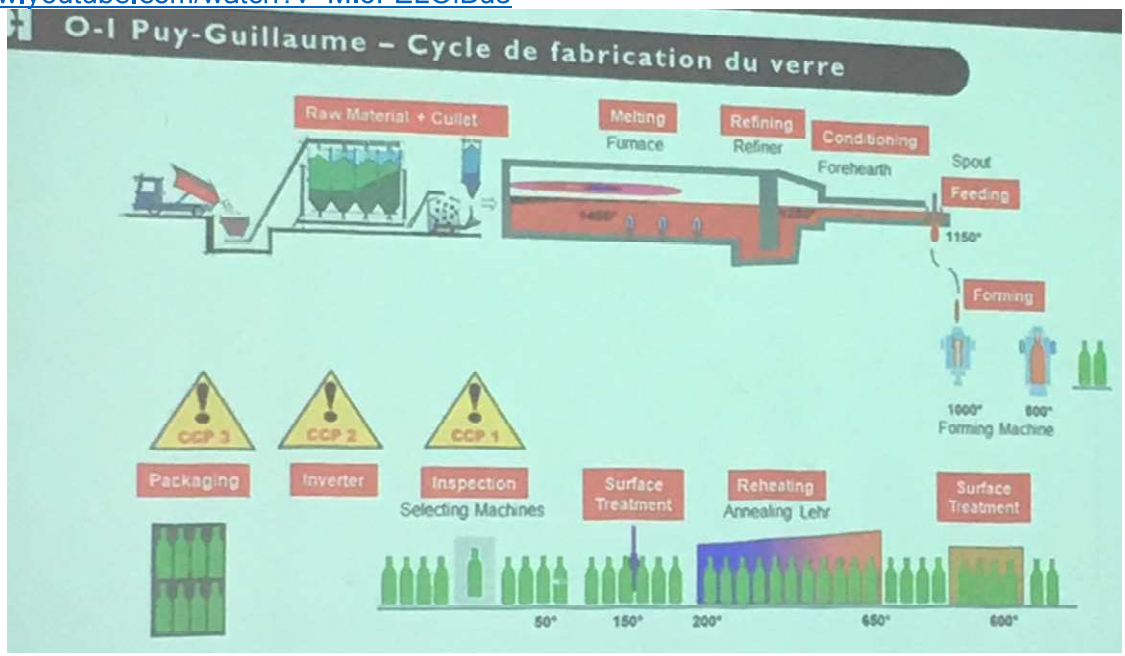
Notions et contenus	Capacités exigibles
Cinétique en réacteur fermé de composition uniforme Vitesses volumiques de consommation d'un réactif et de formation d'un produit. Vitesse de réaction pour une transformation modélisée par une réaction chimique unique (supposée sans accumulation d'intermédiaires).	Relier la vitesse de réaction, dans les cas où elle est définie, à la vitesse volumique de consommation d'un réactif ou de formation d'un produit.

Lois de vitesse : réactions sans ordre, réactions avec ordre simple (0, 1, 2), ordre global, ordre apparent. Temps de demi-vie d'un réactif, temps de demi-réaction.	**Établir une loi de vitesse à partir du suivi temporel d'une grandeur physique.** Exprimer, pour une transformation modélisée par une seule réaction chimique, la loi de vitesse si la réaction chimique admet un ordre et déterminer la valeur de la constante de vitesse à unetempérature donnée. Déterminer la vitesse de réaction à différentes dates en utilisant une méthode numérique ou graphique. Déterminer un ordre de réaction à l'aide de la méthode différentielle ou à l'aide des temps de demi-réaction. Confirmer la valeur d'un ordre par la méthode intégrale, en se limitant strictement à une décomposition d'ordre 0, 1 ou 2 d'un unique réactif, ou se ramenant à un tel cas par dégénérescence de l'ordre ou conditions initiales stœchiométriques. **Capacité numérique :** à l'aide d'un langage de programmation ou d'un logiciel dédié, et à partir de données expérimentales, tracer l'évolution temporelle d'une concentration, d'une vitesse volumique de formation ou de consommation, d'une vitesse de réaction et tester une loi de vitesse donnée.
Loi empirique d'Arrhenius ; énergie d'activation.	**Déterminer l'énergie d'activation d'une réaction chimique.** Déterminer la valeur de l'énergie d'activation d'une réaction chimique à partir de valeurs de la constante cinétique à différentes températures.
Facteurs concentration et température en stratégie de synthèse et d'analyse : dilution, chauffage, reflux, trempe.	Reconnaître, dans un protocole, des opérations visant à augmenter ou à diminuer une vitesse de réaction.

I. <u>Un exemple de procédé industriel : la fabrication du verre (Verrerie OI, Le Puy Guillaume)</u>

Lien film promotionnel OI verrerie (880) Fire and Sand-French Version

https://www.youtube.com/watch?v=MI5FELOiBu8



Durée de passage dans le four 48h ; durée de réchauffage après façonnage 45 min

Un procédé chimique visant à la synthèse d'un produit donné est décomposable en opérations élémentaires appelées opérations unitaires. Ces opérations unitaires sont successives mais il peut y avoir aussi des boucles de rétroaction dans le procédé (par exemple, réinjection des réactifs n'ayant pas réagi à l'entrée d'un réacteur).

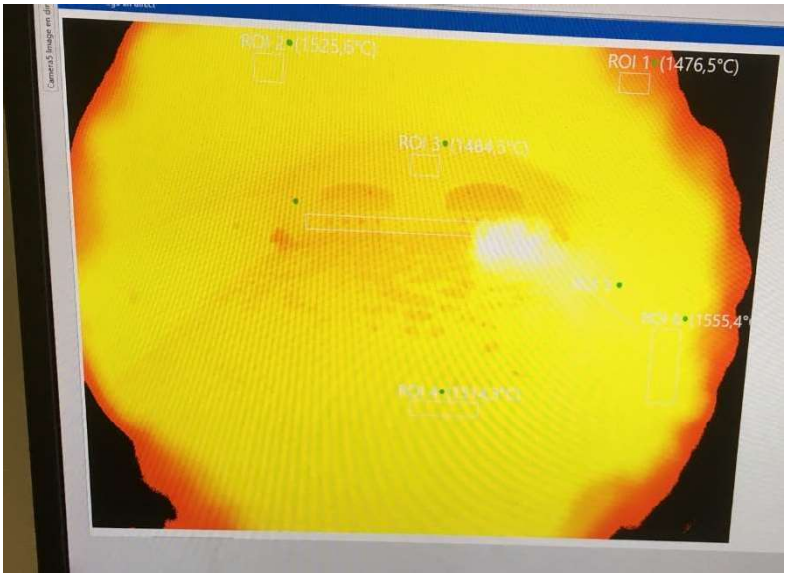
On peut classer les opérations unitaires en trois grandes classes successives :

1) préparation, conditionnement et acheminement des matières premières (réactifs) : il s'agit d'opérations unitaires de nature physique, en général.

Composition de la matière première, mélangée et introduite dans le four :

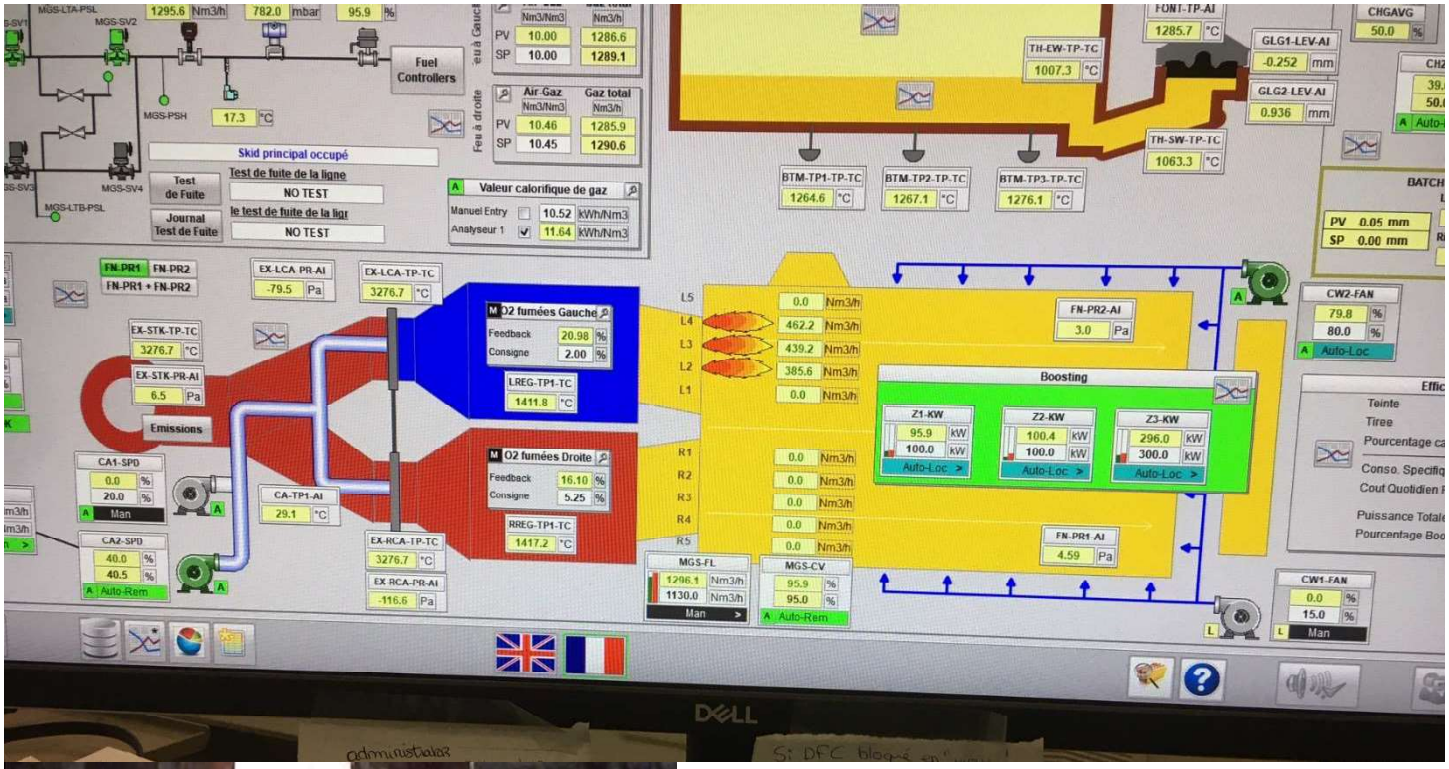
Le **calcin** est du débris de verre ajouté aux matières premières (sable, carbonate de soude…) mises en œuvre pour fabriquer le verre.

2) transformation chimique des réactifs en produits : c'est le cœur du procédé, réalisé dans un réacteur.



3) séparation, purification et conditionnement des produits : il s'agit là encore d'opérations unitaires de nature physique, en général.

Ici tous les procédés sont continus, de la matière entre et sort des différentes parties du montage. Un procédé discontinu a lieu dans un réacteur fermé (étudié en première année)


Fuel Controllers
Skid principal occupé
Test de Fuite
Journal Test de Fuite
Test de fuite de la ligne
NO TEST
le test de fuite de la ligr
NO TEST
Air-Gaz
Gaz total
Valeur calorifique de gaz
O2 fumées Gauche
O2 fumées Droite
Feedback
Consigne
Emissions
Boosting
Z1-KW
Z2-KW
Z3-KW
Auto-Loc
Man
Auto-Rem
BATCH
DELL

Autre exemple de procédé industriel : la synthèse de l'ammoniac (NH_3)

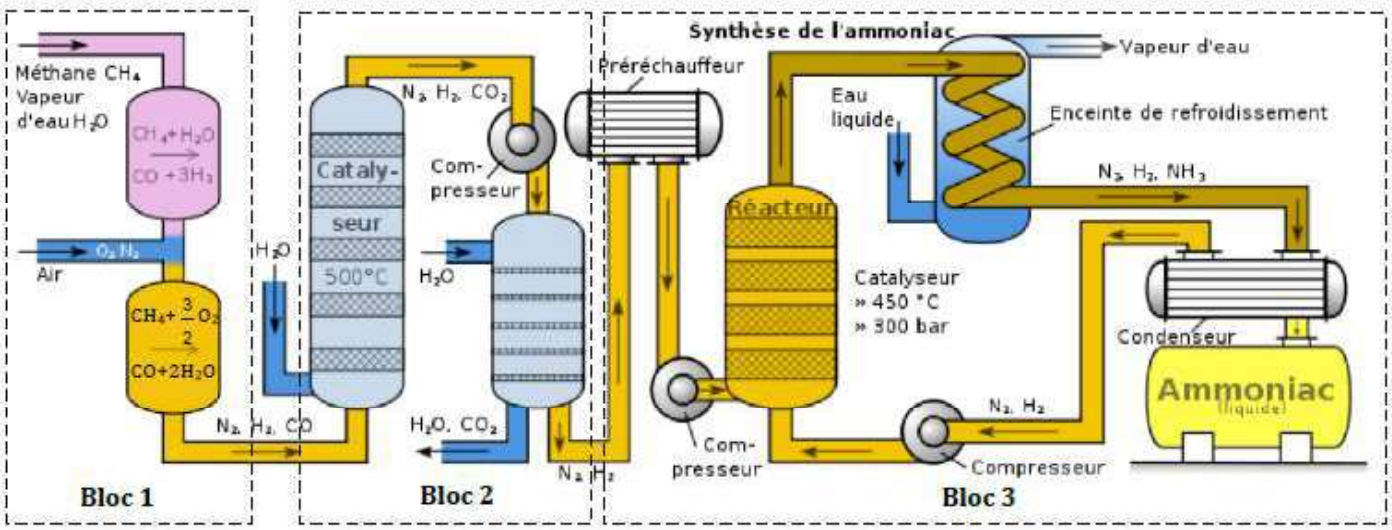
L'azote est un élément essentiel à l'industrie des engrais. Malheureusement, il n'existe pratiquement pas de composés azotés sous forme de gisements économiquement exploitables et il est donc nécessaire de recourir à une synthèse industrielle.
Pour des raisons de coût, les composés azotés recherchés sont synthétisés à partir d'ammoniac, dont 75% de la production annuelle mondiale, qui dépasse les 100 millions de tonnes, est consommée par l'industrie des engrais.

L'ammoniac pur a été produit pour la première fois en 1774 par Priestley. Les travaux de Haber et la mise au point du procédé Haber-Bosch ont abouti à la première production industrielle de l'ammoniac en 1913 dans l'usine BASF en Allemagne. La production de l'ammoniac repose sur la combinaison du diazote et du dihydrogène, toutes les espèces étant à l'état gazeux, qui sont portés à haute température (450°C) et haute pression (300 bar) en présence de catalyseurs solides à base de fer.

Le diazote provient directement de l'air, le dihydrogène est généralement obtenu par décomposition du méthane.

$$N_{2(g)} + 3\ H_{2(g)} = 2NH_{3(g)}$$

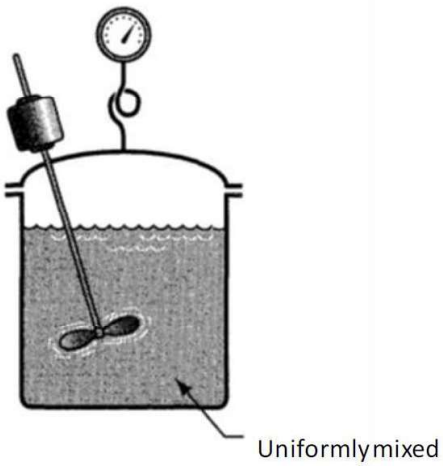
Un schéma de principe, simplifié (source wikipédia), est donné ci-dessous.



bloc 1 : production de H_2 par réformage du méthane
bloc 2 : purification du mélange
bloc 3 : synthèse de NH_3 et stockage sous forme liquide

II. Rappel sur les réacteurs fermés

Dans un tel réacteur fermé, les réactifs sont introduits à $t=0$, puis on les laisse réagir en agitant le mélange réactionnel.
Il n'y a donc ni entrée ni sortie de matière.



Rappel : définition de la vitesse de réaction r ; expression d'une loi de vitesse

1) remplir le reacteur avec les reactifs
2) reacteur ferme → reaction chimique
3) vidange du reacteur

reactifs A, B.

$aA + bB \longrightarrow pP$ ← produit.

Bilan de matière

	aA	$+ bB$	$\rightarrow pP$
$t=0$	n_{0A}	n_{0B}	0
à dt	$n_{0A} - a d\xi$	$n_{0B} - b d\xi$	$p d\xi$

$d\xi$ = avancement élémentaire

vitesse de la reaction r (rate of reaction)

$$r = \frac{1}{V}\frac{d\xi}{dt}$$ V = volume de la reaction.

loi de vitesse $r = k[A]^p[B]^q$ (expérimentale)

p = ordre de la reaction /A
q = ordre de la reaction /B.

[A] = concentration en A.

$p+q$ = ordre global de la reaction.

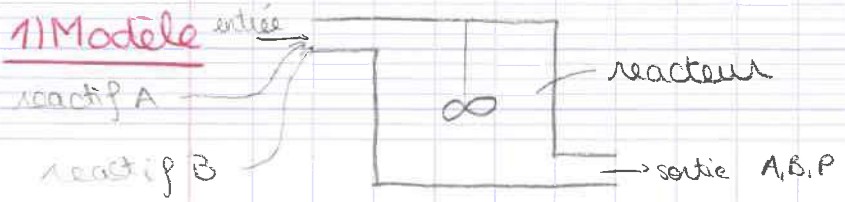
k = cst de vitesse dimensionné

$R(T) = \underset{\text{cst.}}{A} e^{-Ea/RT}$) loi d'ARRHÉNIUS.

Ea = energie d'activation ($J.mol^{-1}$)

III Reacteur parfaitement agité continue. (RPAC)

1) Modèle



$aA + bB = pP$

hyp: dans le réacteur

$[A] = [A]_s$

$[B] = [B]_s$

$[P] = [P]_s$

2) Bilan de matière

$n_A(t+dt)$ = quantité de A dans le réacteur à $t+dt$

$= n_A(t) + \delta n_{Ae} - \delta n_{As} - dn_{A\,réagit}$.

$n_A(t)$: quantité de A à l'instant t dans le réacteur

δn_{Ae} : qui entre dans le réacteur pd dt

δn_{As} : qui sort.

hyp: régime de fonctionnement stationnaire du réacteur

$$n_A(t+dt) = n_A(t)$$

$$\delta n_{Ae} - \delta n_{As} - dn_{A\,réagit} = 0.$$

$$\frac{\delta n_{Ae}}{dt} - \frac{\delta n_{As}}{dt} - \frac{dn_{A\,réagit}}{dt} = 0 \qquad mol.s^{-1}$$

$F = \frac{\delta n}{dt}$ = débit molaire = flux molaire

$$F_{Ae} = F_{As} + \left(\frac{dn_A}{dt}\right)_{\text{qui a réagit}}.$$

	aA	+ bB	$\longrightarrow$ pP
entrée	F_{Ae}	F_{Be}	/
réacteur + sortie	$F_{Ae} - a\frac{d\xi}{dt}$	$F_{Be} - b\frac{d\xi}{dt}$	$p\frac{d\xi}{dt}$
	$F_{Ae} - a r V$	$F_{Be} - b r V$	$p r V$

bilan en flux molaire.

OR par définition
r = vitesse de la réaction.

$$r = \frac{1}{V}\frac{d\xi}{dt}$$

↑ volume du réacteur

or $F_{Ae} = F_{AS} + dn_A \text{ réagit}$.

$F_{AS} = F_{Ae} - a r V$

$F_{BS} = F_{Be} - b r V$

$F_{pS} = p r V$

3) Taux de conversion

déf: taux de conversion de A

$$X_a = \frac{\text{quantité de A qui a réagit}}{\text{quantité de A initiale}} = \frac{\text{flux molaire qui a réagit}}{\text{flux molaire de A entrée}}$$

$$\Rightarrow X_a = \frac{a\frac{d\xi}{dt}}{F_{Ae}}$$

	aA	$+ bB \rightarrow$	pP
entrée	F_{Ae}	F_{Be}	/
réacteur + sortie	$F_{Ae} - a\frac{d\xi}{dt}$	$F_{Be} - b\frac{d\xi}{dt}$	$p\frac{d\xi}{dt}$
	$= F_{Ae} - F_{Ae}X_a$	$F_{Be} - \frac{b}{a}X_a F_{Ae}$	$\frac{pX_a F_{Ae}}{a}$
	$= F_{Ae}(1 - X_a)$		
	$= F_{AS}$	$= F_{BS}$	$= F_{PS}$.

$\nu_a = -a$.

rq: $F_{is} = F_{ie} - F_{ea} X_a \frac{\nu_i}{\nu_a}$ ← nu

4) Temps de passage dans un RPAC

hyp: → fonctionnement stationnaire : conservation de D_m
→ écoulement incompressible : conservation de D_v

par définition : temps de passage.

$\tau = \frac{V}{D_{Ve}}$ ← volume du réacteur (m^3)
← débit volumique à l'entrée ($m^3 . s^{-1}$)

τ en s

V : → $r = \frac{1}{V}\frac{d\xi}{dt}$

$r = k [A]_s^p [B]_s^q$

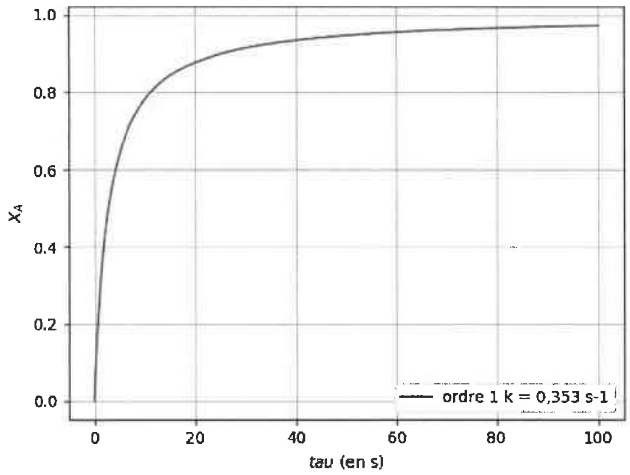
loi de vitesse fait intervenir $[A]$ et $[B]$ dans le réacteur
$[A]_s$ et $[B]_s$ hypothèse du RPAC

Exemple de dimensionnement d'un RPAC
(fichier python X(tau)_RPA_ordre1.py
A → produits ;

cinétique d'ordre 1 k = 0,353 s^{-1}

(pour T = 400 K avec les valeurs ci-dessous)

τ = temps de passage dans le réacteur

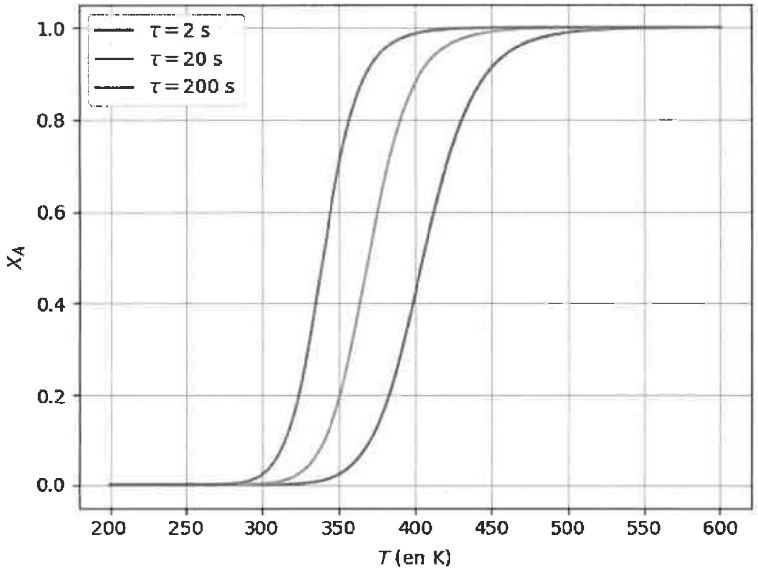


Effet de la température sur le taux de conversion

A → produits : cinétique d'ordre 1 $k_o = 1{,}0.10^{10}$ s^{-1} ; Ea = 80 kJ.mol^{-1}

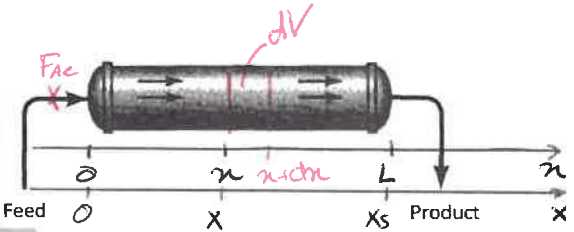
τ = temps de passage dans le réacteur

Fichier python : X(T)_RPA_ordre1



A ⟶ produit
entrée F_{Ae}

IV Réacteur piston



La réaction a lieu dans une canalisation dans laquelle on injecte continûment le(s) réactif(s) avec un débit constant.

L'écoulement y est stationnaire et unidimensionnel et tel qu'une tranche élémentaire de volume d*V* du fluide en écoulement ne subit aucun mélange avec l'amont ou avec l'aval (pas de processus diffusifs axiaux).

La réaction se fait « de proche en proche » et donc, **la composition** du mélange réactionnel **évolue spatialement** depuis l'entrée jusqu'à la sortie du réacteur.

La composition du mélange réactionnel situé dans un volume élémentaire d*V* situé à une abscisse **fixe** au sein du réacteur **n'évolue pas temporellement** (régime stationnaire).

On prélève en sortie du réacteur un débit constant de fluide ayant la composition du mélange réactionnel de sortie.

Bilan de matière sur une tranche de longueur dx et de section S du réacteur dV = Sdx

A → produits

$$\underset{mol.m^{-3}}{[A]}^{int} = \frac{F_A}{DV}$$

IV Reacteur à piston

$$A \longrightarrow \text{produit}$$

entree $x=0$	F_{Ae}	
x	$F_{Ae} - \frac{d\xi}{dt}$	
$X = \frac{d\xi}{dt}$	$F_{Ae}(1-X)$	

$$F_{AS}(x) = F_{Ae}(1 - X(x))$$

$V = \int dV$ dV = volume de reacteur élémentaire

bilan de A entre x et $x+dx$ dans dV pendant dt.

$$\underset{\text{dans dV}}{n_a}(t+dt) = \underset{\text{dans dV}}{n_a}(t) + \delta n_a(x) - \delta n_a(x+dx) - dn_{a\,reagit}$$

← stationnaire →

$$\delta n_a(x) - \delta n_a(x+dx) - dn_{a\,reagit} = 0$$

$$F_a(x) - F_A(x+dx) - \frac{dn_a}{dt} = 0$$

$$-\frac{dF_A}{dt} = \frac{d\xi}{dt} \quad \text{avec} \quad R = \frac{1}{dV}\frac{d\xi}{dt}$$

$$-\frac{dF_A}{dt} = r\,dV \quad \text{or} \quad F_A(x) = F_{Ae}(1 - X(x))$$

donc $dF_A = -F_{Ae}\,dX$.

volume du reacteur en fonction de X

$$V = \int dV = \int -\frac{dF_A}{r} = \int_0^{X_s} \frac{1}{r} F_{Ae}\, dX = V$$

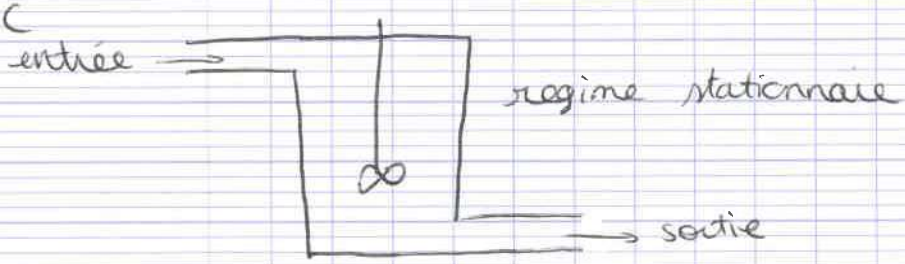
OR $r = k[A]^r = k[A(X)]^p$

$$[A(X)] = \frac{F_A(X)}{Dv} = \frac{F_{Ae}(1-X)}{Dv}$$

$$\tau = \frac{V}{Dv}$$

V Bilan thermique en reacteur ouvert

RPAC



	aA	$+bB$	$\longrightarrow pP$
entrée réacteur + sortie	F_{Ae}	F_{Be}	
	$F_{Ae} - a\frac{d\xi}{dt}$	$F_{Be} - b\frac{d\xi}{dt}$	$p\frac{d\xi}{dt}$
	$= F_{Ae} - X_A F_{Ae}$	$= F_{Be} - \frac{bX_A F_{Ae}}{a}$	$= \frac{pX_a F_{Ae}}{a}$

avec $X_a = \frac{a\, d\xi/dt}{F_{Ae}}$ $\qquad \frac{d\xi}{dt} = \frac{X_a F_{Ae}}{a}$

généralisation $F_{is} = F_{ie} - \frac{\nu_i}{\nu_a} X_a F_{Ae}$

pour $i = A$ $\quad F_{As} = F_{Ae} - \frac{\nu_a}{\nu_a} X_a F_{Ae}$ avec $\nu_b = -b$

$i = B$ $\quad F_{Bs} = F_{Be} - \frac{\nu_b}{\nu_a} X_a F_{ae}$ $\qquad \nu_a = -a$

$$i = P \quad F_{ps} = F_{pe} - \frac{\nu_p}{\nu_a} X_a F_{Ae} = 0 - \frac{P}{-a} X_a F_{Ae}$$

entrée		sortie	
A	F_{Ae}	A	F_{As}
B	F_{Be}	B	F_{Bs}
espèce inerte (eau, N_2, ...)	F_{In}	P	F_{ps}
		espèce inerte	F_{In}
	T_e		T_s

2) Application du premier principe "industriel"

$\Delta e_c = 0$ et $\Delta e_p = 0$. $\mathcal{P}_{meca} = 0$.

D_m ($kg.s^{-1}$) $(h_s - h_e)$ ($J.kg^{-1}$) $= \mathcal{P}_{th}$ $\rightsquigarrow$ $D_m h_s$ ($J.s^{-1}$) $= F$ (flux molaire, $mol.s^{-1}$) $\times H$ ($J.mol^{-1}$ ← enthalpie)

$$F_s H_s - F_e H_e = \mathcal{P}_{th}$$

$\neq H_{ine}$ car $T_e \neq T_s$

$$\left(F_{As} H_{As} + F_{Bs} H_{Bs} + F_{ps} H_{ps} + F_{In} H_{Ins}\right) - \left(F_{Ae} H_{Ae} + F_{Be} H_{Be} + F_{In} H_{ine}\right) = \mathcal{P}_{th}$$

N ← nb de constituant.

$$\sum_{i=1}^{N} \underbrace{\left(F_{ie} - \frac{\nu_i}{\nu_a} X_a F_{Ae}\right)}_{= F_{is}} H_{is} + F_{In}(H_{Ins} - H_{ine}) - \sum_{i=1}^{N} F_{ie} H_{ie} = \mathcal{P}_{th}.$$

$$\rightsquigarrow \sum_{i=1}^{N} F_{ie} \underbrace{(H_{is} - H_{ie})}_{C_{pmi}(T_s - T_e)} + \sum_{i=1}^{N} -\frac{\nu_i}{\nu_a} X_a F_{Ae} H_{is} + F_{In} \underbrace{(H_{Ins} - H_{ine})}_{C_{pmin}(T_s - T_e)} = \mathcal{P}_{th}$$

milieu $-\frac{X_a}{\nu_a} F_{Ae} \sum_{i=1}^{N} \nu_i H_{is} = -\frac{X_a}{\nu_a} F_{Ae} \Delta_R H°$

$\sum_{i=1}^{N} \nu_i H_{is}$: loi de Hess.

$\Delta_R H°$: enthalpie standard de réaction de sortie = enthalpie standard de réaction.

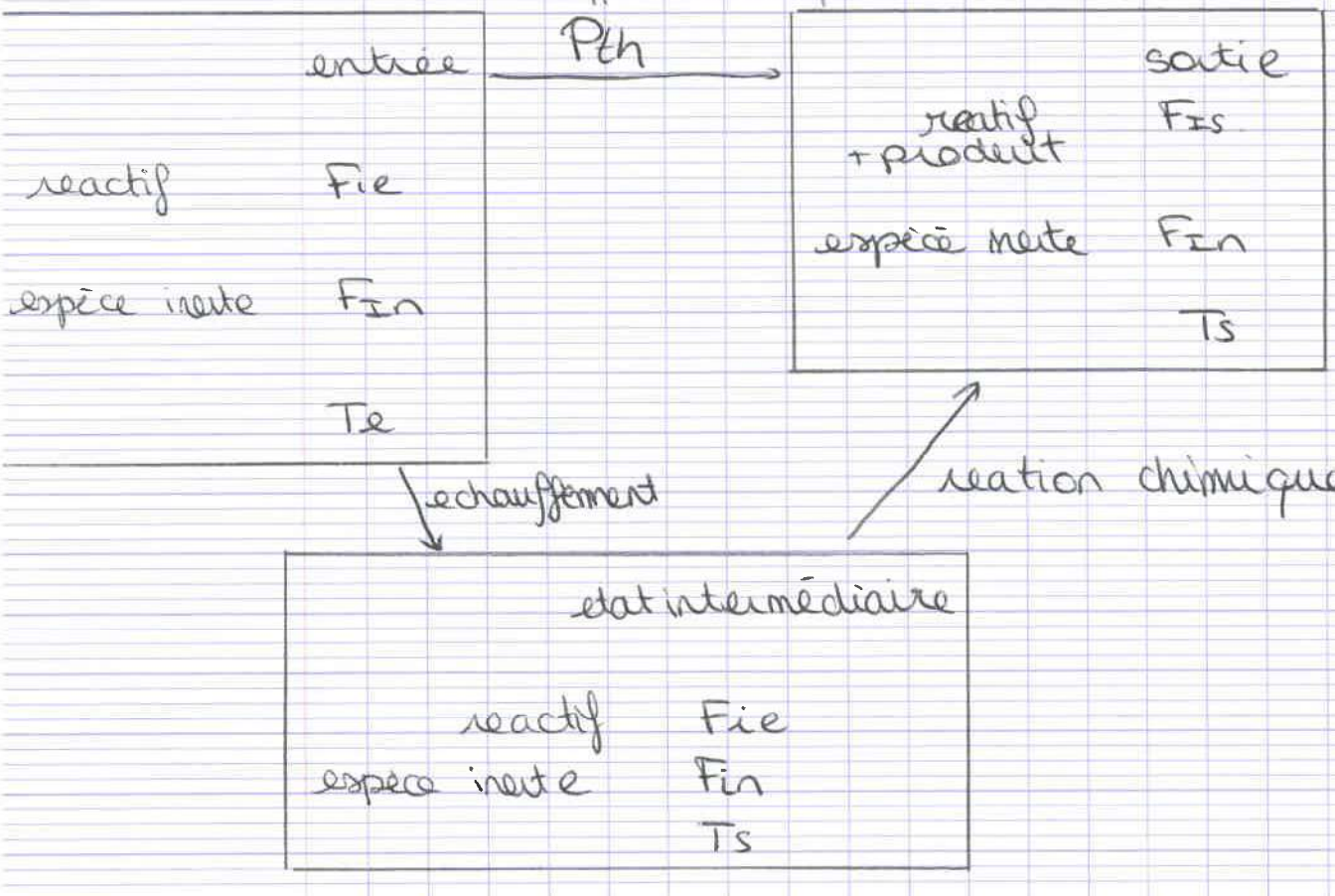
$$\sum_{i=1}^{N} F_{ie} (C_{pMi} (T_s - T_e) - \frac{X_a}{\nu_a} F_{ae} \Delta_R H° + F_{in} (C_{pM_{in}} (T_s - T_e) = P_{th}$$

$$\left(\sum_{i=1}^{N} F_{ie} (C_{pMi} + F_{in} (C_{pM_{in}}) \right) (T_s - T_e) - \frac{X_a}{\nu_a} F_{ae} \Delta_R H° = P_{th}$$

physique = échauffement des espèces inertes et des réactifs de T_e à T_s

chimie "$Q = n \Delta_R H°$"
ν_a négatif.
$\frac{X_a}{-\nu_a} F_{ae}$ positif

$P_{th} = 0$ pour réacteur adiabatique.



$$X_a = -\nu_a \frac{\left(P_{th} - \left(\sum_{i=1}^{N} \left(F_{ie} C_{pmi} + F_{in} C_{pmin}\right)\right)\right)}{F_{Ae}\, \Delta_R H^\circ} (T_s - T_e)$$

↳ X_a donné par la thermo. OR il existe X_a cinétique } X_a = intersection des 2 phénomènes

3. Point de fonctionnement du réacteur adiabatique

	A ⟶	produit	cinétique d'ordre 1
entrée	F_{Ae}	/	
réacteur + sortie	$F_{Ae}(1-X)$	$F_{Ae} X$	

X donné par la cinétique : $X(\tau)$ temps de passage

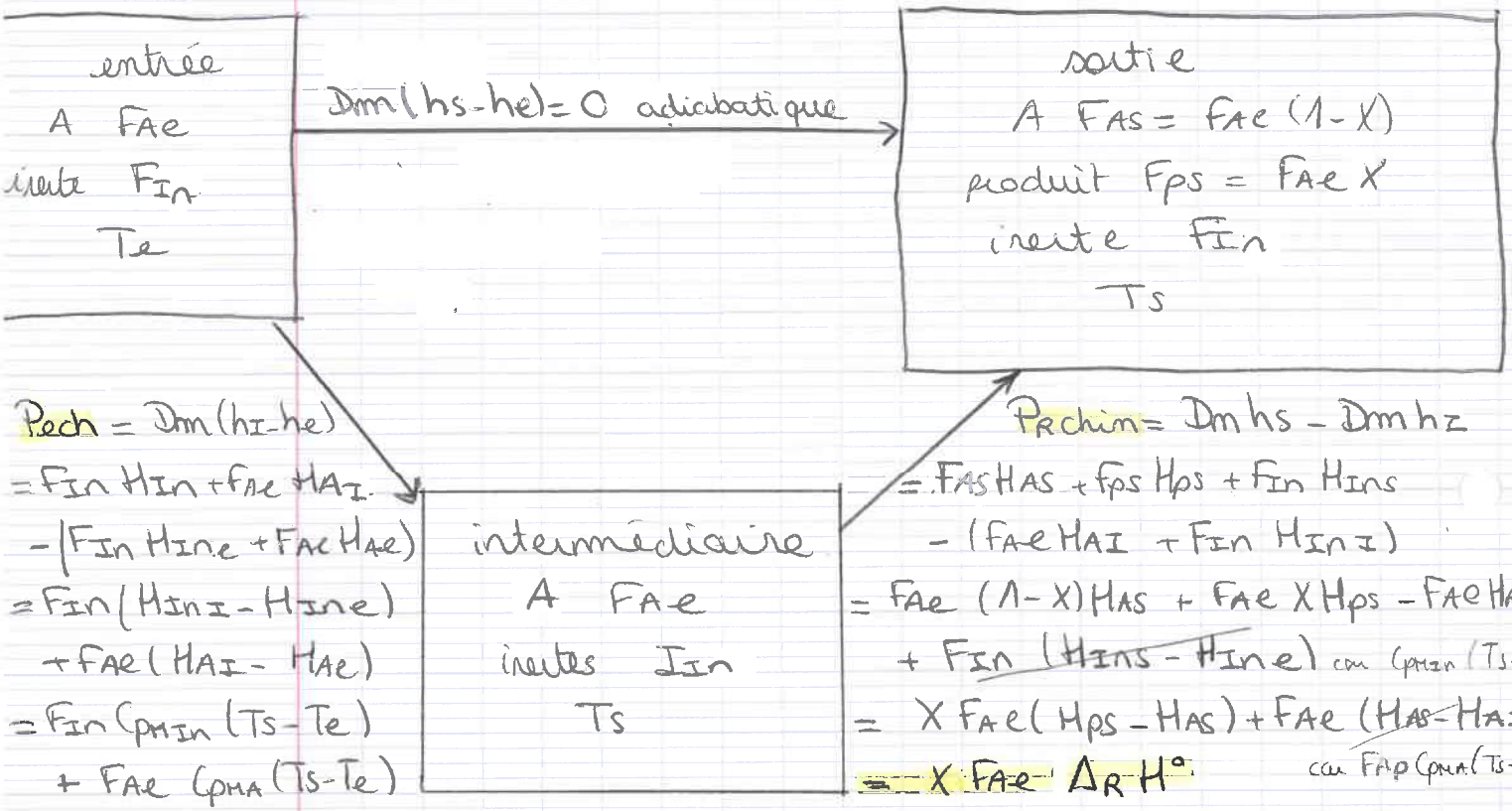
$$\tau = \frac{V}{D_{ve}} \qquad r = \frac{1}{V}\frac{d\xi}{dt} = \frac{1}{V} F_{Ae} X.$$

$$\tau = \frac{F_{Ae} X}{R\, D_{ve}} = \frac{F_{Ae} X}{k [A]_s D_{ve}} = \frac{F_{Ae} X}{k \frac{F_{As}}{D_{vs}} D_{ve}}$$ or $D_{ve} = D_{vs}$ hyp.

$$\tau = \frac{F_{Ae} X}{k F_{Ae}(1-X)} = \frac{X}{k(1-X)} \iff X = \tau k (1-X) = \frac{\tau k}{1+\tau k}$$

$$X_{cinétique}(T_s) = \frac{\tau k_0 e^{-E_a/RT_s}}{1 + \tau k_0 e^{-E_a/RT_s}}$$

X donné par la thermo :



$P_{ech} = Dm(h_I - h_e)$
$= F_{In} H_{In} + F_{Ae} H_{AI} - (F_{In} H_{Ine} + F_{Ae} H_{Ae})$
$= F_{In}(H_{InI} - H_{Ine}) + F_{Ae}(H_{AI} - H_{Ae})$
$= F_{In} C_{pmIn}(T_s - T_e) + F_{Ae} C_{pMA}(T_s - T_e)$
$= (F_{In} C_{pmIn} + F_{Ae} C_{pMA})(T_s - T_e)$
$\approx Dme\ cpe\ (Ts - Te)$

$P_{Rchin} = Dm\,hs - Dm\,hz$
$= F_{AS} H_{AS} + f_{ps} H_{ps} + F_{In} H_{Ins} - (F_{Ae} H_{AI} + F_{In} H_{InI})$
$= F_{Ae}(1-X) H_{AS} + F_{Ae} X H_{ps} - F_{Ae} H_{AI} + F_{In}(H_{Ins} - H_{Ine})$ avec $C_{pmIn}(T_s - T_I)$
$= X F_{Ae}(H_{ps} - H_{AS}) + F_{Ae}(H_{AS} - H_{AI})$ avec $F_{Ap} C_{pMA}(T_s - T_i)$
$= X F_{Ae} \Delta_R H°$

$Dm(hs - he) = 0$.
$Dm(hs - h_I) + Dm(h_I - hs) = 0$.
$P_{Rchimm} + P_{ech} = 0$.
$(F_{In} C_{pIn} + F_{Ae} C_{pnA})(T_s - T_e) = - X F_{Ae} \Delta_R H°$.

$$X_{thermo}(T_s) = -\frac{(F_{In} C_{pIn} + F_{Ae} C_{pnA})(T_s - T_e)}{F_{Ae} \Delta_R H°} = \gamma (T_s - T_e)$$

point de fonctionnement de réacteur
$X_{thermo}(T_s) = X_{cinétique}(T_s)$

b) Réaction endothermique

$\Delta_R H° > 0$ et $\gamma < 0$.

c) réaction exothermique.

$\Delta_R H° < 0$ $\gamma > 0$.

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 ouvert siège d'une transformation modélisée par une réaction isotherme unique et en discuter la stabilité.

a. Notion de point de fonctionnement

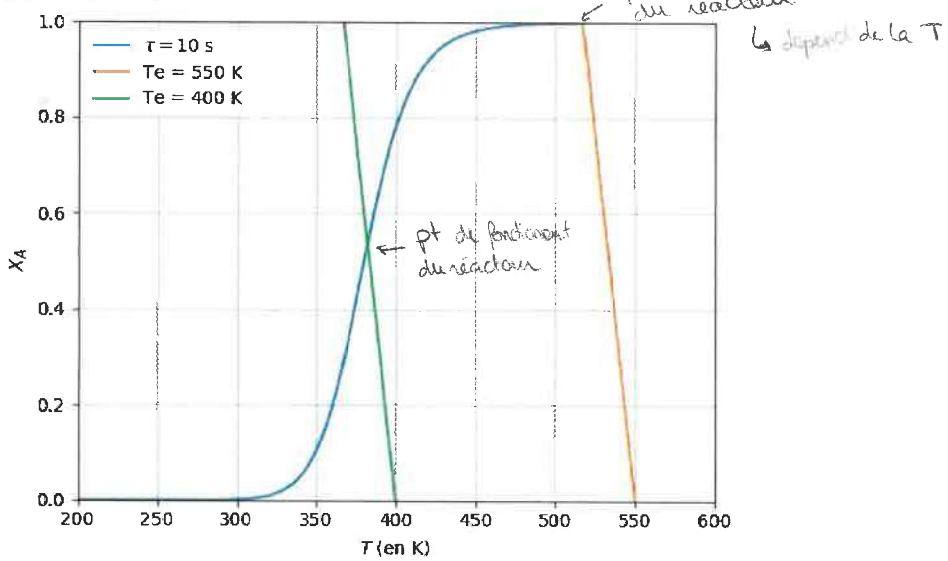
Ordre 1 : $A \rightarrow P$ $\quad r = k(T).C_{As} \quad k(T) = k_o.e^{(-Ea/RT)}$

Cinétique : $X_A = \frac{k(T)\tau}{1+k(T)\tau}$; Thermodynamique $X_A = \gamma.(T_S - T_e)$

b. Réaction endothermique : $\gamma < 0$

$E_a = 80$ kJ/mol et $k_o = 1{,}0.10^{10}$ s^{-1} ; $\gamma = -0{,}03$ SI pour un temps de passage de 10s

Fichier python : X(T)_RPA_ordre1_endo.py



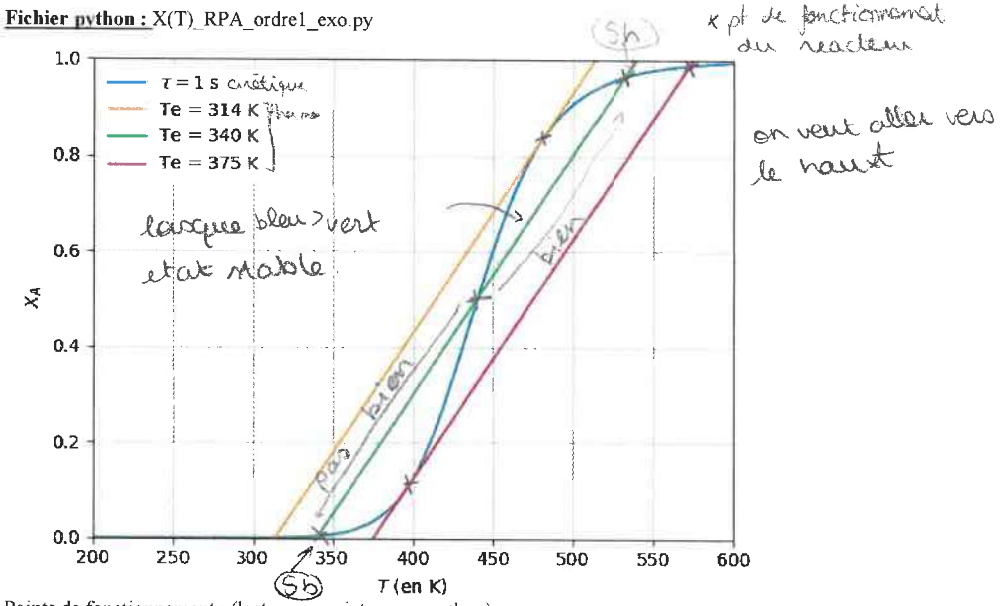
Points de fonctionnement : (lecture au pointeur sur python)

Pour $T_e = 400$ K ; $T_s = 381$ K ; $X_A = 0{,}53$ Pour $T_e = 550$ K ; $T_s = 516$ K ; $X_A = 1$

c. Réaction exothermique : $\gamma > 0$

$E_a = 70$ kJ/mol et $k_o = 2{,}0.10^8$ s^{-1} ; $\gamma = 0{,}05$ SI pour un temps de passage de 1 s

Fichier python : X(T)_RPA_ordre1_exo.py



Points de fonctionnement : (lecture au pointeur sur python)

Te (K)	314	340			375	
Ts (K)	482	343	440	534	396	572
X_A	0,84	0,01	0,50	0,96	0,10	0,99

Si Te < 314 K un seul point de fonctionnement, mais $X_A \rightarrow 0$, pas intéressant

Si Te > 375 K un seul point de fonctionnement avec X_A proche de 1, intéressant, situation recherchée, point spontanément atteint, autoallumage du réacteur.

Si 314 K < Te < 375 K 3 points de fonctionnement a priori possibles

Etude du point milieu :

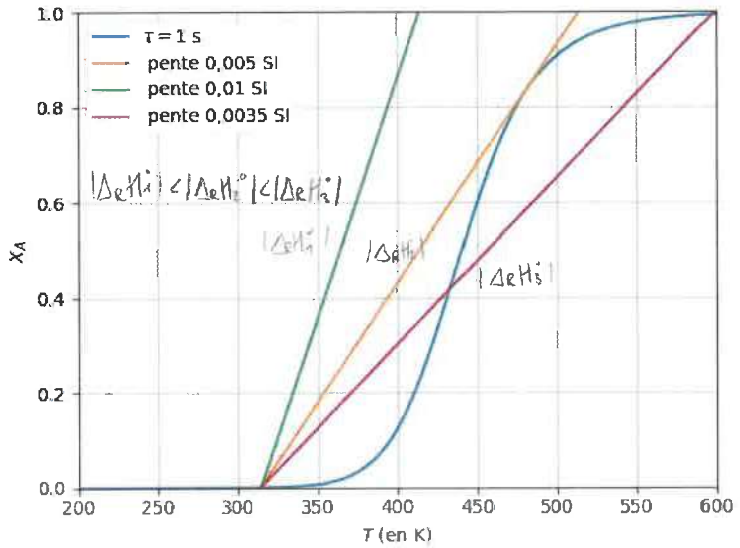
Si la température augmente légèrement à partir de ce point, l'énergie dégagée par la réaction augmente plus vite que l'énergie consommée par le mélange réactionnel car la pente de la courbe cinétique est plus élevée que celle de la courbe thermodynamique1. Le réacteur gagnera donc le point le plus élevé, qui lui est stable (ordre des pentes inversé) : température élevée et taux de conversion élevé, donc réaction auto-entretenue.

Si la température diminue un peu à partir du point milieu, l'énergie libérée par la réaction diminue plus vite que l'énergie consommée par le mélange réactionnel (toujours l'ordre des pentes). Par conséquent, le réacteur gagnera le point lu plus bas, stable caractérisé par une température faible et un taux de conversion également faible. La réaction n'est pas auto-entretenue.

On peut donc considérer le point milieu comme le point d'ignition : si la température du mélange réactionnel est amenée au-dessus de T_I, la réaction sera auto-entretenue.

δ qui change

Te = 314 K ; la pente est inversement proportionnelle à $\Delta_r H$



Détermination des points de fonctionnement par programmation

Fichier python : X(T)_resol num.py

Pour une température To donnée, le point de fonctionnement est dans l'intervalle $[T_0, T_0+1/\gamma]$

On utilise la méthode bisect (dichotomie) de scipy