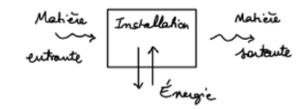


Dans l'industrie les réacteurs chimiques sont des systèmes **ouverts** : de la matière entre en continu (entrée) et de la matière sort en continu (sortie).



Entrée : réactifs
Sortie : produits et réactifs
On travaille à l'échelle industrielle, c'est à dire du mètre cube.

Débit molaire
 $D_A = \frac{D_{m,A}}{M_A}$
Les débits s'ajoutent algébriquement.
 $D_{m,tot} = \sum_i \nu_i D_{m,i}$
En régime stationnaire le débit massique se conserve.
 $D_{m,tot} = D_{m,tot}^*$

Avancement par unité de temps

$\xi = \frac{d\xi}{dt}$
Exemple de la synthèse de l'acide sulfanilique

	$1. PhNH_2$	$+ H_2SO_4$	$= HOSO_2 C_6H_4NH_2$	$+ H_2O$
Entrée	6,47	4,93	0	1,71
Sortie	$6,47 - \xi$	$4,93 - \xi$	ξ	$1,71 + \xi$

Debit molaire constant d'acide sulfanilique

Taux de conversion
Défini par rapport au réactif limitant
 $\alpha = \frac{\xi}{\xi_{max}}$

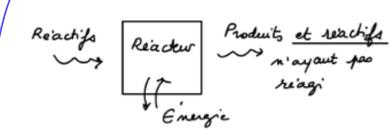
On peut le faire apparaître dans le tableau d'avancement

	$PhNH_2$	$+ H_2SO_4$	$= HOSO_2 C_6H_4NH_2$	$+ H_2O$
Entrée	6,47	4,93	0	1,71
Sortie	$6,47 - 4,93\alpha$	$4,93(1-\alpha)$	$4,93\alpha$	$1,71 + 4,93\alpha$

Vitesse de réaction

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

On peut toujours faire des tableaux d'avancement mais temporels.



Conservation du débit volumique
 $D_{V,tot} = D_{V,tot}^*$
Unique réaction chimique
Écoulements incompressibles et homogènes
Lien avec la concentration molaire
 $D_A = [A] D_V$
Lien avec le débit massique
 $D_m = \mu D_V$
Temps de passage
 $\tau = \frac{V}{D_V}$
Temps pour qu'un volume égal à celui du réacteur soit passé dans celui-ci

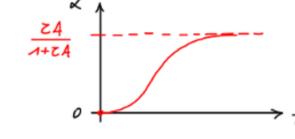
Réacteur parfaitement agité (RCPA)
 $[R_i]^e = T_e$
 $T_r = T = [R_i]^a = [R_i]$
 $[P_i]^a = [P_i]$
 $[R_i]$
 $[P_i]$
 $\tau = \tau_e$

Réacteur piston (RP)
 L
 $x + dx$
 $[R_i]^e$
 $[R_i]^a$
 $[R_i](x)$
 $[R_i](x+dx)$
 $[P_i](x)$
 $[P_i](x+dx)$

Modèle : On considère que les réactifs entrants sont **mélangés instantanément** et que la concentration des réactifs et des produits est **la même dans le réacteur et à sa sortie**.
On réalise un bilan en exprimant le débit de sortie à partir du tableau d'avancement.

$D_A^* = D_A^* - \nu_A \xi$
On fait apparaître les concentrations et le tau de conversion.
 $D_V[A]^* = D_V[A]^e(1 - \alpha)$
On fait apparaître les concentrations et la vitesse de réaction.
 $D_V[A]^* = D_V[A]^e - vV$

RCPA
 $T_s = T = T_e$
Énergie d'activation
Loi d'Arrhénius
 $k = A e^{-E_a/RT}$
Facteur pré-exponentiel
 A
Expression du taux de conversion
 $\alpha = \frac{\tau A e^{-E_a/RT}}{1 + \tau A e^{-E_a/RT}}$
Expression du taux de conversion
 $\alpha = \frac{k\tau}{1 + k\tau}$
Variation avec la température

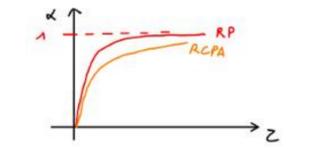


Modèle : On considère que les tranches n'échangent pas de matière entre elles **partie située entre x et x+dx peut être considérée comme un RCPA**.
On réalise un bilan en exprimant le débit de sortie à partir du tableau d'avancement.

Première expression de la relation entre les concentrations en entrée/sortie
 $\frac{[A]^*}{[A]^e} = (1 - \alpha)$
On fait apparaître les concentrations et le tau de conversion.
 $D_V[A]^* = D_V[A]^e(1 - \alpha)$

Loi de vitesse : exemple d'une loi d'ordre 1
 $v = k [A] = k [A]^*$
On fait apparaître les concentrations et la vitesse de réaction.
Seconde expression de la relation entre les concentrations en entrée/sortie
 $\frac{[A]^*}{[A]^e} = e^{-k\tau}$
 $D_V[A]^*(x + dx) = D_V[A]^*(x) - vV$

Expression du taux de conversion
 $\alpha = 1 - e^{-k\tau}$
La comparaison est à l'avantage du RP



On exprime la variation d'enthalpie massique.
 $\Delta h = c_p^e(T_s - T_e) + \frac{\Delta_r H^e \xi}{D_m}$
On exprime l'avancement par unité de temps en fonction du tau de conversion
 $\xi = \alpha D_V [A]^e$
On applique le premier principe en version industrielle.
 $D_m \Delta h = p_{th}$

On obtient l'équation thermochimique.
 $D_V (\mu_{eau}^e(T_s - T_e) + \Delta_r H^e \alpha [A]^e) = p_{th}$

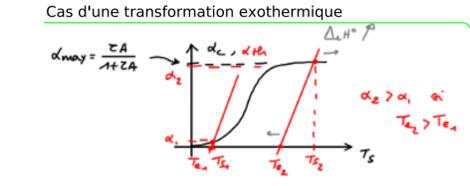
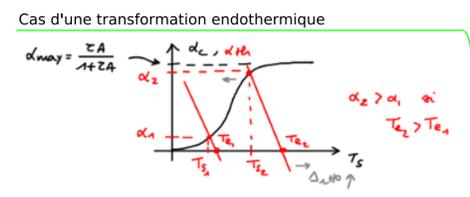
Équation thermodynamique

$\alpha_{th} = -\frac{\mu_{eau}^e}{\Delta_r H^e [A]^e} (T_s - T_e)$

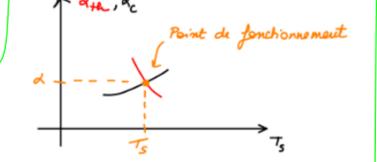
Équation cinétique (cinétique d'ordre 1)

$\alpha_c = \frac{\tau A e^{-E_a/RT_s}}{1 + \tau A e^{-E_a/RT_s}}$

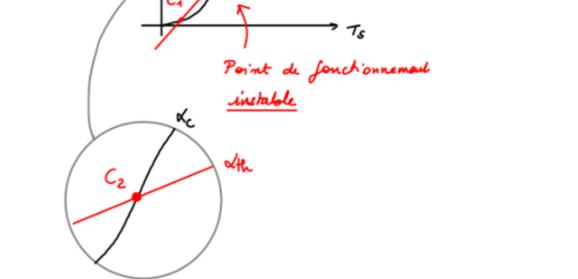
Étude thermique d'un RCPA
 $T_s \neq T_e$



Résolution graphique



Cas d'une transformation exothermique avec 3 points de fonctionnement



... Fonctionnement avec un flux thermique
 $p_{th} \neq 0$