

Calcul-Hydrodynamique de réacteurs

Acquis d'apprentissage

A l'issue des enseignements portant sur le calcul et l'hydrodynamique des réacteurs (CM, TD et TP), les élèves doivent être capables :

- D'exprimer un débit de transformation chimique (r) pour une réaction d'ordre (n) fixé.
Question d'examen type : pas de question particulière, cette compétence sera évaluée au cours d'un exercice de synthèse portant sur la détermination d'une conversion, au travers de l'expression du terme « production » dans le bilan matière.
Le cas particulier de la détermination de l'ordre n d'une réaction à partir de la courbe cinétique réactionnelle $C(t) = f(t)$ a été abordé dans l'exercice III.2.
- D'écrire un bilan matière au sein d'un réacteur idéal (RPA ou REP), fermé ou continu, en régime permanent ou transitoire.
 - Ce bilan matière pourra être réalisé sur un réactif de sorte à calculer : soit la concentration en sortie de réacteur C_A puis la conversion X_A à volume de réacteur V fixé ; soit le volume nécessaire V pour atteindre une conversion X_A cible.
Question d'examen type : en partant de l'écriture du bilan de type « Entrée + Production = Sortie + Accumulation », vous devrez savoir remplacer les 4 termes de ce bilan en fonction du type de réacteur (fermé, continu, semi-fermé \rightarrow termes Entrée / Sortie), de régime (permanent, transitoire \rightarrow terme Accumulation) et de l'ordre de la réaction (\rightarrow terme Production).
Selon que le réacteur est de type RPA ou REP, vous serez amené à réaliser une intégration de l'équation obtenue par rapport au temps (RPA en régime transitoire) ou à (z) (cas du REP) pour déterminer la concentration en sortie de réacteur (C_A) puis $X_A = (C_0 - C_A)/C_0$ ou V .
[exercices I.2 ; I.4 ; I.7 ; I.8 ; I.9 ; I.10 ; I.11 ; I.12 ; I.13 ; I.14 ; I.15 ; I.16 ; I.17 ; III.4]
 - Vous devrez également savoir réaliser un bilan matière au sein d'un réacteur idéal sur un traceur (inerte, en régime transitoire) à des fins d'établissement de la concentration de sortie $C(t)$.
Question d'examen type : en partant de l'écriture du bilan matière sur le traceur de type « Entrée + Production = Sortie + Accumulation », vous devrez savoir remplacer les 4 termes de ce bilan en fonction du type d'injection (impulsion, échelon \rightarrow Entrée, Sortie), sachant que, dans le cas d'un traceur, le régime sera de type transitoire (\rightarrow terme accumulation $\neq 0$) et le terme Production sera nul. La résolution de ce BM permettra d'établir la fonction $C(t)$ [exercices II.2 ; II.7 ; III.3 ; III.4]
- De mettre en œuvre la détermination expérimentale d'une distribution de temps de séjour (DTS), à partir de l'injection de type échelon ou impulsion d'un traceur.
Question d'examen type : cet aspect sera évalué en TP
- De savoir déterminer la fonction DTS $E(t)$ et le temps de séjour moyen \bar{t}_s à partir de la concentration de sortie en traceur $C(t)$ (établie par BM pour un réacteur idéal ou déterminée expérimentalement pour un réacteur réel).
Question d'examen type : savoir, selon que l'injection est de type impulsion ou échelon, comment exprimer $E(t)$ en fonction de $C(t)$:
 - Dans le cas d'un REP ou RPA, vous utiliserez la fonction $C(t)$ issue du BM sur le traceur [exercices II.2 ; II.7] ou la courbe expérimentale $C(t)$ en sortie de réacteur [exercice II.3]
 - Dans le cas d'un réacteur réel, vous utiliserez la courbe expérimentale $C(t)$ [exercices II.1 ; II.4 ; II.5 ; II.6 ; II.7]

Cette démarche pourra également permettre le calcul du nombre de moles de traceurs injectées dans le cas d'une injection impulsion [exercices II.3 ; II.5 ; II.6 ; II.7].

- D'utiliser une DTS expérimentale ou une fonction de DTS $E(t)$ pour déterminer, pour une injection de traceur de type échelon ou impulsion, si des anomalies d'écoulement sont présentes dans le réacteur (et savoir identifier ces anomalies).

Question d'examen type : en partant de la fonction $E(t)$, vous calculerez par intégration le temps de séjour moyen réel \bar{t}_s , que vous comparerez au temps de séjour moyen théorique, qui est le temps de passage τ ($=V/Q$) pour déterminer la présence éventuelle de volumes morts ($\bar{t}_s < \tau$) ou de court-circuits ($\bar{t}_s > \tau$).

La comparaison pourra également être faite, pour une injection de type impulsion, sur le nombre de moles injectées en entrée et le nombre de moles ayant quitté le réacteur (calculé à partir de $n_{\text{réelle}} = \int_0^{\infty} QC(t)dt$) [exercice II.5]

- De savoir calculer la conversion au sein d'un réacteur réel, modélisé :
 - soit par une association de réacteurs idéaux,
 - soit par couplage de l'évolution de la concentration en réacteur fermé du fait de la réaction et de la DTS dans le réacteur réel,
 - soit par un modèle macroscopique de mélange à 1 paramètre en l'absence d'anomalie d'écoulement,
 - soit par un modèle macroscopique de mélange à 2 paramètres en présence d'anomalies d'écoulement.

Question d'examen type :

- Pour l'association de réacteurs idéaux : cette compétence revient à associer en série la compétence développée pour un réacteur idéal.
- Pour le couplage de l'évolution de la concentration en réacteur fermé du fait de la réaction et de la DTS dans le réacteur réel, il faudra mettre en œuvre l'expression :
$$\bar{C} = \int_0^{\infty} C_{\text{RF}}(t)E(t)dt \quad [\text{exercices I.17 ; III.2 ; III.3}]$$
- Pour les modèles à 1 paramètre : en partant du tracé expérimental de la fonction $C(t)$ ou $E(t)$, ou des variables caractéristiques de $E(t)$ (σ^2, τ), vous devrez dans un premier temps savoir calculer le paramètre du modèle considéré (j ou Ez), puis, dans le cas d'une réaction d'ordre 1, utiliser le paramètre obtenu pour calculer la conversion X [exercices II.8 ; II.9 ; II.10 ; II.11 ; III.4]
- Pour les modèles à 2 paramètres, savoir réaliser un BM sur un RPA avec anomalies d'écoulement (débit court-circuité + présence d'un volume mort) pour déterminer les paramètres du modèle (α, β) ; puis en déduire à partir d'un BM sur le réactif, l'expression de la concentration de sortie donc de la conversion en fonction de (α, β) [exercice III.5]