

## 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 → termes Entrée / Sortie), de régime (permanent, transitoire → terme Accumulation) et de l'ordre de la réaction (→ 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 → Entrée, Sortie), sachant que, dans le cas d'un traceur, le régime sera de type transitoire (→ 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  $\tau$  ( $=V/Q$ ) 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  $E(t)$  ( $\sigma^2, \tau$ ), 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 ( $\alpha, \beta$ ) ; 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 ( $\alpha, \beta$ ) [exercice III.5]