

### 3.1 Généralité

L'étude des réacteurs chimiques est basée sur les **bilans** de matière, de chaleur et de quantité de mouvement, ainsi que sur la **cinétique chimique**.

L'**approche macroscopique** qui tend à idéaliser les systèmes, est la plus pratique. Dans ce cas des **modèles idéalisés**, où l'on néglige les pertes de charge, les phénomènes de diffusion, les gradients de concentration, de température, etc., sont utilisés pour simuler les divers transports du fluide réactionnel, ce sont:

- Les **modèles à mélangeage parfait**.
- Les **modèles à écoulement piston**,

L'expérience prouve d'ailleurs qu'un grand nombre de réactions se font en pratique dans des réacteurs sensiblement idéaux.

- On traitera ici de réacteurs homogènes : une seule phase (liquide ou gaz).
- On verra le cas d'une réaction, puis de réactions multiples.
- Afin de modéliser les phénomènes physiques en milieu monophasique, il est utile d'introduire la notion de réacteurs idéaux.

#### 3.1.1. Réacteurs idéaux

Dans le domaine du génie chimique, on trouve trois grandes classes de réacteurs idéaux:

1. les réacteurs qui travaillent avec des flux continus : Les réacteurs continus ou ouverts parfaitement agité (ROPA, RCPA, RPA) (en anglais CSTR-Continuous Stirred-Tank Reactor);
2. les réacteurs à écoulement piston (REP, RP) (PFTR : Plug Flow Tubular Reactor, PFR : Plug Flow Reactor);
3. les réacteurs discontinus ou fermés (RF) (batch reactor) ;
4. les réacteurs semi-continus ou semi-fermés (RSF) (fed-batch) qui se situent entre le réacteur fermé et le réacteur ouvert.

Ces réacteurs sont appelés réacteurs idéaux, car ils servent de modèle de base pour le design de procédés chimiques. Ils sont définis par un certain nombre d'hypothèses qui facilitent la modélisation du procédé.

##### a. Réacteur continu

Les hypothèses liées au modèle du réacteur continu sont les suivantes:

- Mélange homogène au niveau moléculaire;
- Température homogène du milieu;
- Volume et densité constants (débit d'entrée = débit de sortie);
- Concentrations et température du flux de sortie sont les mêmes que celles dans le réacteur.

### b. Réacteur discontinu

Les hypothèses liées au modèle du réacteur discontinu sont les suivantes :

- mélange homogène au niveau moléculaire ;
- température homogène du milieu ;
- volume constant (débit d'entrée = débit de sortie = 0).

### c. Réacteur semi-continu

Le réacteur semi-continu est très semblable au réacteur discontinu. Le principal changement provient du fait que le volume change durant la réaction. Les principales hypothèses du modèle sont ainsi:

- mélange homogène au niveau moléculaire ;
- température homogène du milieu.

### d. Réacteur à écoulement piston

Les hypothèses liées au modèle du réacteur piston sont les suivantes:

- le mélange radial est considéré comme parfait ;
- l'écoulement est de type piston ;
- la densité constante ;
- pas de mélange axial.

### 3.1.2. Notion de système

Elément ou ensemble d'éléments d'intérêt, délimité(s) par une frontière (pas forcément réelle).

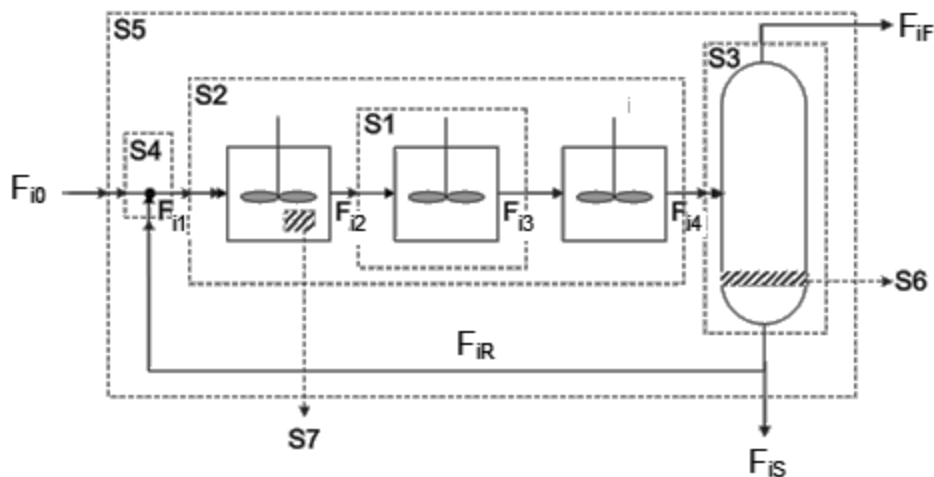


Figure 3.1 présentation des systèmes

S1 à S5 représentent des systèmes macroscopiques.

S6 et S7 représentent des systèmes microscopiques : un élément de fluide de volume  $dV$ , délimité par des frontières (fictives), que sont les surfaces par lesquelles a lieu l'écoulement.

### 3.2. Notion et écriture des bilans

Les bilans sont une expression des lois de conservation dans les processus chimiques et physiques. Dans une réaction chimique, la masse totale reste constante (sauf dans les réactions nucléaires !!!) « Loi de LAVOISIER ».

En Génie des Réacteurs, les bilans sont en général écrits à l'échelle macroscopique, sur les composés (réactifs et produits)

- L'écriture en masse ou en moles est alors équivalente.
- L'écriture en moles est la plus pratique, puisque la stœchiométrie de la réaction peut être prise en compte directement.

#### 3.2.1. Bilans globaux

- Peuvent être appliqués sur l'ensemble des courants, sur les composés qui le constituent, ou sur les éléments.
- La somme des bilans globaux de tous les constituants ou de tous les éléments d'un courant est égale au bilan global total.
- Les bilans globaux peuvent être écrits et résolus, sans besoin de connaître la vitesse de la réaction qui a lieu, donnent uniquement un renseignement général sur l'entrée et la sortie mais ne permettent pas le calcul du réacteur.
- Les bilans globaux aux composés et aux éléments nécessitent de connaître la stœchiométrie et/ou l'avancement de la réaction qui ont lieu.
- Si la composition dans le réacteur est uniforme (indépendante de la position), le bilan peut être écrit sur l'ensemble du réacteur. Dans le cas contraire, il doit être écrit sur un élément de volume différentiel et intégré ensuite sur tout le réacteur pour tenir compte des conditions de concentration et d'écoulement appropriés.
- En opérations non isothermes, le bilan de matière doit évidemment être complété par un bilan d'énergie.

On traitera ici de réacteurs homogènes : une seule phase (liquide ou gaz). On verra le cas d'une réaction, puis de réactions multiples.

Pour établir un bilan de matière dans un réacteur, il faut qu'il existe une variation des paramètres opératoires. Faisons le choix d'un volume ou d'un élément de volume déterminé, siège d'une transformation chimique, et considérons un constituant «  $i$  ».

Remarque : On parle souvent indifféremment de volume de « mélange réactionnel » et « volume du réacteur » :

- Dans les systèmes liquides, seul le terme « volume du mélange réactionnel » est strictement juste, et c'est celui qui doit être compris.
- Dans les systèmes gazeux, les deux se confondent, puisque les gaz (mélange réactionnel) s'adaptent aux contenants (réacteur)

La conservation de la matière exige qu'à chaque instant existe la relation :

$$\left[ \begin{array}{c} \text{débit de } i \\ \text{entrant} \end{array} \right] + \left[ \begin{array}{c} \text{débit} \\ \text{de production} \\ \text{de } i \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c} \text{débit de } i \\ \text{sortant} \end{array} \right] + \left[ \begin{array}{c} \text{débit} \\ \text{d'accumulation} \\ \text{de } i \end{array} \right] \mp \left[ \begin{array}{c} \text{débit de } i \\ \text{transférer} \end{array} \right] \quad (3.1)$$

### 3.2.2. Les termes du bilan de matière

1. Les termes d'**entrée** et de **sortie** représentent les flux de matière qui rentrent et sortent du système avec les courants (écoulement convectif) ( $kg.s^{-1}$ ,  $mol.s^{-1}$ ) :

- Un système est dit **ouvert (continu)**, lorsque ces termes sont non nuls (au moins pour un courant)
- Un système est dit **fermé (discontinu)**, lorsque ces termes sont nuls.

2. Le terme de **réaction** représente la matière qui réagi (générée ou consommée) dans le système suite à une réaction (chimique, biochimique, électrochimique) ( $kg.s^{-1}$ ,  $mol.s^{-1}$ ). **Si dans le système il n'y a pas de réaction ce terme est égal à zéro.**

3. Le terme de **variation** de la masse représente l'accumulation ou l'épuisement de matière dans le système avec le temps ( $kg.s^{-1}$ ,  $mol.s^{-1}$ ). Dans les **systèmes ouverts en régime stationnaire, ou permanent, ce terme est égal à zéro...**

4. Le terme de **transfert** représente l'échange de matière entre les phases présentes dans le système ( $kg.s^{-1}$ ,  $mol.s^{-1}$ ). Dans les **systèmes monophasiques ce terme est égal à zéro.**

### 3.2.3. Résolution d'un bilan

Pour le moment on s'intéressera qu'aux systèmes **monophasiques**, le **terme de transfert** sera donc toujours égal à 0, l'**expression** (3.1) devient :

$$\left[ \begin{array}{c} \text{débit de } i \\ \text{entrant} \\ \text{(E)} \end{array} \right] + \left[ \begin{array}{c} \text{débit de production} \\ \text{de } i \\ \text{(P)} \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c} \text{débit de } i \\ \text{sortant} \\ \text{(S)} \end{array} \right] + \left[ \begin{array}{c} \text{débit} \\ \text{d'accumulation} \\ \text{de } i \\ \text{(Acc)} \end{array} \right] \quad (3.2)$$

Donc le bilan sur  $j$  dans le volume  $V$  est écrit :

$$F_{iE} + R_i V(t) = F_{iS} + \frac{dn_i}{dt} \quad (3.3)$$

$F_{iE}$  : Flux de l'élément  $i$  à l'entrée du réacteur [ $mole/s$ ] ;

$F_{iS}$  : Flux de l'élément  $i$  à la sortie du réacteur [ $mole/s$ ] ;

$V$  : volume du mélange réactionnel dans le réacteur [ $m^3$ ] ;

$R_i$  : vitesse de transformation du réactif  $i$  par rapport au volume  $V$  [ $mole/s.m^3$ ] ;

$\frac{dn_i}{dt}$  : Débit d'accumulation.

**Remarque :** pour les Flux (ou débits) massiques (ou molaires), les calculs pour un constituant (composé) est toujours le produit de la concentration de l'espèce dans un courant par le débit du courant, il faut juste s'assurer que les unités sont cohérentes.

Par exemple :

$$\text{Flux molaire de } i \text{ (mol/h)} : F_i = C_i Q = x_i F \quad (3.4)$$

$$\text{Flux massique de } i \text{ (kg/h)} : Q_{mi} = \rho Q \quad (3.5)$$

$$\text{Flux molaire total (mol/h)} : F = C'_i Q_m \quad (3.6)$$

$Q$  : c'est le débit volumique du mélange réactionnel ( $m^3/h$ ) ;  $\rho$  : la masse volumique du mélange réactionnel ( $kg/m^3$ ) ;  $F$  : flux total du mélange ;  $C_j$  : concentration molaire de  $i$  ( $mol/m^3$ ) ;  $C'_i$  : concentration massique de  $i$  ( $kg/m^3$ ) ;  $x_i$  : la fraction molaire de  $i$ .

Nous allons exploiter l'équation (3.1) dans des configurations particulièrement simple, qui permettent d'approcher le fonctionnement de la majorité des réacteurs industriels, ou constituent des briques élémentaires pour en construire des modèles. Ces configurations simples sont celles des **réacteurs idéaux**:

### 3.2.4. Bilan à un nœud : système ouvert en régime permanent sans réaction chimique

Dans un nœud, il n'y a pas de réaction chimique mais uniquement des courants qui se séparent ou se rejoignent, les bilans de matière peuvent alors être écrits en masse ou en mole indifféremment.

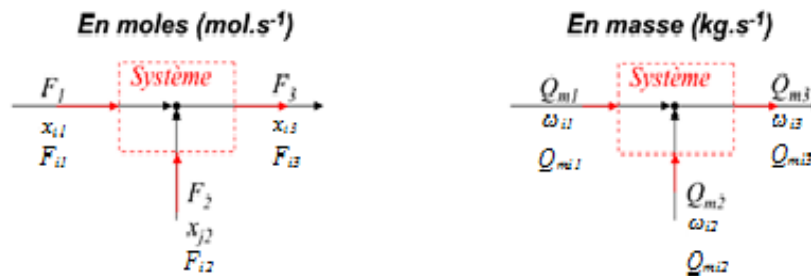


Figure 3.2 présentation des nœuds

#### Bilan global (en moles)

$$F_{i3} = F_{i1} + F_{i2} \text{ soit } F_{i1} + F_{i2} - F_{i3} = 0 \quad (3.7)$$

$$x_{i3} F_{i3} = x_{i1} F_{i1} + x_{i2} F_{i2} \text{ soit } x_{i1} F_{i1} + x_{i2} F_{i2} - x_{i3} F_{i3} = 0 \quad (3.8)$$

#### Bilan au constituant $i$ (en masse)

$$Q_{mi3} = Q_{mi1} + Q_{mi2} \text{ soit } Q_{mi1} + Q_{mi2} - Q_{mi3} = 0$$

$$\omega_{i3} Q_{mi3} = \omega_{i1} Q_{mi1} + \omega_{i2} Q_{mi2} \text{ soit } \omega_{i1} Q_{mi1} + \omega_{i2} Q_{mi2} - \omega_{i3} Q_{mi3} = 0$$

### 3.3. Application du bilan matière aux différents types de réacteurs idéaux

#### 3.3.1 Bilan de matière pour un Réacteur Fermé agité (Batch Reactor)

L'expression pour un élément  $\Delta V$  peut donc s'appliquer à l'ensemble du volume  $V$  de phase réactionnelle. Les termes correspondant aux débits entrant et débit sortant (sont nuls) disparaissent, puisqu'il n'y a ni apport, ni soutirage de matière.

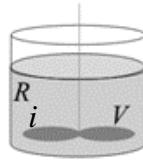


Figure 3.3 Réacteur Fermé agité

L'expression (3.3) se réduit à :

$$R_i V(t) = \frac{dn_i}{dt} \Rightarrow r_j = \frac{dn_i}{v_{ij} V dt} \quad (3.9)$$

Avec

$v_{ij}$  : Le coefficient stœchiométrique algébrique

(< 0 pour les réactifs et > 0 pour les produits).

$r_j$  : La vitesse de la réaction  $j$ . (c'est nous avons une réaction unique on peut écrire  $r$ )

$R_i$  : vitesse de transformation du réactif  $i$  par rapport au volume  $V$  [mole/ s.m<sup>3</sup>]

$V(t)$  : Le volume du mélange réactionnel à l'instant  $t$ .

#### Equations caractéristiques (aux avancements)

$$r_j = \frac{dn_i}{v_{ij} V dt} \quad \text{avec} \quad n_i = n_{i0} + v_{ij} n_0 X_j \Rightarrow dn_i = v_{ij} n_0 dX_j$$

$$r_j = \frac{n_0}{V} \frac{dX_j}{dt} \quad (3.10)$$

$$\text{Pour une réaction unique :} \quad r = \frac{n_0}{V} \frac{dX}{dt} \quad (3.11)$$

#### Le volume du mélange réactionnel

S'il y'a lieu des dilatations, l'expression de  $V$  est :

$$V = \beta V_0 (1 + \alpha X) \quad \text{pour une réaction à stœchiométrie unique} \quad (3.12)$$

$$V = \beta V_0 (1 + \sum_j \alpha_j X_j) \quad \text{pour une réaction à stœchiométrie multiple} \quad (3.13)$$

**Le temps de passage  $\tau$**  ( $\tau = \frac{V}{Q_0}$ ): s'il n'y a pas de passage du mélange réactionnel,  $\tau$  est indéfini.

**Le temps de séjour  $t_s$ :**  $t_s = n_0 \int_0^{X_j} \frac{dX_j}{Vr_j}$  (3.14)

*a. Exemple pour une réaction simple (unique ou à stœchiométrie unique)*

Soit la réaction :  $A \rightarrow P$  dans un réacteur fermé

Si on s'intéresse au réactif A, on peut écrire le bilan par rapport à A, et y faire intervenir la conversion  $x_A$  avec dans ce cas précis  $\nu_A = -1$  (par rapport au réactif).

Pour un composé  $i$  intervenant dans une réaction simple, sa vitesse de transformation de qui sera :  $R_i = \nu_i r$

**Résolution du bilan de matière au réactif A**

$$R_A V = \frac{dn_A}{dt} \Rightarrow r = -\frac{dn_A}{Vdt} \quad (3.15)$$

$$\Rightarrow r = -\frac{d(VC_A)}{Vdt} \quad (3.16)$$

1. Si le volume est constant, on peut le sortir de la dérivée de l'équation (3.16):

$$r = -\frac{d(C_A)}{dt} \quad (3.17)$$

Par intégration des équations (3.10) et (3.11), on peut calculer le temps de séjour  $t_s$  :

En fonction de  $n_A$  :  $r = -\frac{dn_A}{Vdt} \Rightarrow t_s = \frac{-1}{V} \int_{n_{A0}}^{n_A} \frac{dn_A}{r}$  (3.18)

En fonction de  $X$  :  $r = -\frac{dn_A}{Vdt} \Rightarrow t_s = \frac{n_0}{V} \int_0^X \frac{dX}{r}$  (3.19)

En fonction de  $x_A$  :  $r = -\frac{dn_A}{Vdt} \Rightarrow t_s = \frac{n_{A0}}{V} \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{r}$  (3.20)

En fonction de  $C_A$  :  $r = -\frac{d(C_A)}{dt} \Rightarrow t_s = \int_{C_{A0}}^{C_A} \frac{-d(C_A)}{r}$  (3.21)

Si la cinétique est d'ordre 1 :  $r = k C_A$  ;  $C_A = n_A / V \Rightarrow r = k \frac{n_A}{V}$

En fonction de  $n_A$ :

$$t_s = \frac{-1}{V} \int_{n_{A0}}^{n_A} \frac{dn_A}{r} \Rightarrow t_s = \frac{1}{k} \int_{n_{A0}}^{n_A} \frac{-dn_A}{n_A} = \frac{1}{k} \ln \left( \frac{n_{A0}}{n_A} \right) \Rightarrow n_A = n_{A0} \exp(-kt)$$

En fonction de  $X$  :

$$t_s = \frac{n_0}{V} \int_0^X \frac{dX}{r} \Rightarrow t_s = \frac{1}{k} \int_0^X \frac{dX}{(1-X)} \Rightarrow t_s = \frac{1}{k} \ln \left( \frac{1}{1-X} \right)$$

En fonction de  $x_A$  :

$$t_s = \frac{n_{A0}}{V} \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{r} \Rightarrow t_s = \frac{1}{k} \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{(1-x_A)} \Rightarrow t_s = \frac{1}{k} \ln \left( \frac{1}{1-x_A} \right)$$

En fonction de  $C_A$  :

$$r = k C_A = \frac{-d(C_A)}{dt} \Rightarrow t_s = \int_{C_{A0}}^{C_A} \frac{-d(C_A)}{k C_A} = \frac{1}{k} \ln \left( \frac{C_{A0}}{C_A} \right) \Rightarrow C_A = C_{A0} \exp(-kt)$$

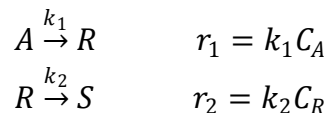
2. Si le volume n'est pas constant :  $V = \beta V_0 (1 + \alpha X)$

Le temps de séjour  $t_s$  nécessaire pour faire passer le mélange d'un avancement  $X_E$  à un avancement  $X_S$  s'obtient:

$$\begin{aligned} r &= - \frac{dn_A}{V dt} \text{ avec } n_A = n_{A0} + v_A n_0 X \text{ et } dn_A = v_A n_0 dX = - n_0 dX \\ \therefore r V &= n_0 \frac{dX}{dt} \Rightarrow t_s = n_0 \int_{X_E}^{X_S} \frac{dX}{\beta V_0 (1 + \alpha X) r} \\ \Rightarrow t_s &= C_0 \int_{X_E}^{X_S} \frac{dX}{\beta (1 + \alpha X) r} \end{aligned} \quad (3.22)$$

### B. Exemple pour des réactions simultanées

Considérons le système de réactions du premier ordre, en phase liquide isotherme :



Les bilans des constituants s'écrivent, d'après le système :

$$-V k_1 C_A = \frac{d n_A}{dt}$$

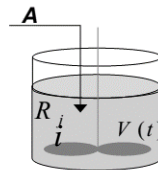


$$V(k_1 C_A - k_2 C_R) = \frac{d n_R}{dt}$$

$$V k_2 C_R = \frac{d n_S}{dt}$$

**3.3.2. Bilan de matière pour un Réacteur semi Continu**

Pour un réacteur semi discontinu avec entrée le terme correspondant au débitsortant disparaisse, puisqu'il n'y a pas de soutirage de matière.



**Figure 3.4 Réacteur semi Continu avec entrée**

L'expression (3.3) devient :

$$F_{iE} + R_i V(t) = \frac{dn_i}{dt} \tag{3.23}$$

$$F_{iE} + R_i V(t) = F_{iE} + V(t) \sum_{j=1}^{NR} v_{ij} r_j = \frac{dn_i}{dt} \tag{3.24}$$

**Exemple pour une réaction simple (unique ou à stœchiométrie unique)**

Soit la réaction :      **A → P**       $r = k C_A$

**Résolution du bilan de matière au réactif A**

$$F_{AE} + R_A V(t) = \frac{dn_A}{dt} \Rightarrow Q C_{AE} + k C_A V = \frac{dn_A}{dt} \quad (Q \text{ débit volumique d'entrée})$$

$$\Rightarrow Q C_{AE} + k C_A V = \frac{dn_A}{dt} \Rightarrow \frac{dn_A}{dt} + k n_A = Q C_{AE} \dots\dots(*)$$

\* : Équation différentielle du 1<sup>er</sup> ordre avec second membre

Résolution de l'équation \* :

Etape 1 :

$$\frac{dn_A}{dt} + k n_A = 0 \quad \Rightarrow \frac{dn_A}{n_A} = -k dt \quad \Rightarrow n_A = c_1 e^{-kt} \quad \dots\dots (1)$$

Etape 2 :

$$(1) \Rightarrow n'_A = c'_1 e^{-kt} - k c_1 e^{-kt} \quad \dots\dots\dots(2)$$

Remplaçant (1) et (2) dans \* :  $c'_1 = QC_{AE} e^{kt}$  .....(3)

L'intégration de l'équation (3) donne :  $c_1 = \frac{QC_{AE}}{k} e^{kt} + c_2$ .....(4)

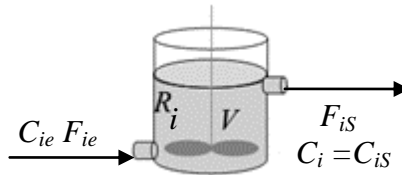
Etape 3 :

Remplaçant (4) dans et (1) :  $n_A = \left(\frac{QC_{AE}}{k} e^{kt} + c_2\right) e^{-kt}$

$$\text{à } t = 0, n_A=0 \Rightarrow c_2 = \frac{-QC_{AE}}{k} \Rightarrow n_A = \frac{QC_{AE}}{k} (1 - e^{kt})$$

**3.3.3. Bilan de matière dans un réacteur ouvert (ou continu) parfaitement Agité**

On fera un bilan sur un constituant sur tout le réacteur figure (3.5). Le bilan contient des termes d'entrée et de sortie, mais pas d'accumulation, car on travaille en régime permanent. Soit une concentration à l'entrée  $C_{iE} = C_{i0}$  et une concentration à la sortie de  $C_{iS} = C_i$ .



**Figure 3.5 Réacteur continu parfaitement agité**

On peut écrire le bilan sur  $i$ , sur le volume total du réacteur :

$$F_{ie} + R_i V(t) = F_{is} \tag{3.25}$$

Pour une réaction multiple  $F_{ie} + V(t) \sum_{j=1}^{NR} \nu_{ij} r_j = F_{is}$  (3.26)

$$Q_{ie} C_{ie} + V(t) \sum_{j=1}^{NR} \nu_{ij} r_j = Q_{is} C_{is} \tag{3.27}$$

Pour une réaction unique  $F_{ie} + \nu_i r V(t) = F_{is}$  (3.28)

$$Q_{ie} C_{ie} + \nu_i r V(t) = Q_{is} C_{is} \tag{3.29}$$

( $Q_e, Q_s$ , débits volumique d'entrée et de sortie du mélange réactionnel)

L'expression du bilan de matière générale pour un réacteur isotherme à débit constant  $Q_e = Q_s = Q$  sera donc :  $QC_{ie} + \nu_i r V(t) = QC_{is}$  (3.30)

**Equations caractéristiques (aux avancements)**

A.

$$(3.26) \Rightarrow \sum_{j=1}^{NR} \nu_{ij} r_j = \frac{F_{iS} - F_{ie}}{V(t)} \quad (3.31)$$

B.

$$(3.28) \Rightarrow F_{i0}(1 - x_{ie}) + \nu_i r V = F_{i0}(1 - x_{is}) \Rightarrow F_{i0}(x_{ie} - x_{is}) = \nu_i r V$$

$$\frac{x_{is} - x_{ie}}{V} = \frac{r}{F_{i0}} = \frac{r}{Q C_{i0}} \quad \text{Si } x_{ie} = 0, \frac{x_i}{V} = \frac{r}{Q C_{i0}} \quad (3.32)$$

C.

$$(3.28) \Rightarrow (F_{i0} + \nu_i F_0 X_e) + \nu_i r V = (F_{i0} + \nu_i F_0 X_s) \Rightarrow F_0(X_s - X_e) = r V$$

$$\frac{X_s - X_e}{V} = \frac{r}{F_0} = \frac{r}{Q C_0} \quad \text{si } X_e = 0, \quad \frac{X}{V} = \frac{r}{Q C_0} \quad (3.33)$$

**La variation du débit volumique du mélange réactionnel**

S'il y'a lieu des dilatations, l'expression de Q est :

$$Q = \beta Q_0(1 + \alpha X) \quad \text{pour une réaction à stœchiométrie unique} \quad (3.34)$$

$$Q = \beta Q_0(1 + \sum_j \alpha_j X_j) \quad \text{pour une réaction à stœchiométrie multiple} \quad (3.35)$$

**Le temps de passage  $\tau$ :**

T est appelé le temps de passage du réacteur, c'est le temps mis pour traiter un volume de mélange réactionnel égal au volume du réacteur. Il est défini par :  $\tau = V/Q_0$

$$(3.33) \Rightarrow \tau = C_0 \frac{(X_s - X_e)}{r} \quad (3.36)$$

$$\text{si } X_e = 0, X_s = X, \quad \tau = \frac{C_0 X}{r} \quad (3.37)$$

$$(3.32) \Rightarrow \tau = C_{i0} \frac{(x_{is} - x_{ie})}{r} \quad (3.38)$$

$$\text{si } x_{ie} = 0, x_{is} = x, \quad \tau = \frac{C_{i0} x_i}{r} \quad (3.39)$$

**Le temps de séjour  $t_s$  :**

On définit un autre temps  $t_s$ , le temps de séjour moyen du fluide. Ces deux temps ( $\tau$  et  $t_s$ ) sont égaux si le débit est uniforme dans le réacteur.

$$t_s = \frac{V}{Q} = \frac{V}{\beta Q_0(1 + \alpha X)}$$

$$\frac{X}{V} = \frac{r}{Q_0 C_0} \Rightarrow V = \frac{Q_0 C_0 X}{r}$$

$$t_s = \frac{V}{Q} = \frac{Q_0 C_0 X}{Q r} = \frac{Q_0 C_0 X}{\beta Q_0(1 + \alpha X)r}$$

$$t_s = \frac{C_0 X}{\beta(1 + \alpha X)r} \quad (3.40)$$

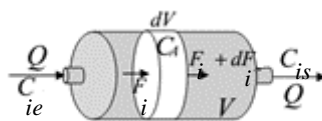
**Exemple :** cinétique d'ordre 1  $r = kC_A$

$$Q_e C_{Ae} + v_A r_s V = Q_s C_{As}$$

$$Q_e C_{Ae} - k C_{As} V = Q_s C_{As} \text{ et si } Q \text{ est uniforme, } C_{As} = \frac{C_{Ae}}{1 + k \frac{V}{Q}} = \frac{C_{Ae}}{1 + k\tau}$$

**3.3.4. Bilan de matière dans un Réacteur Piston**

Ici, la concentration est uniforme sur une section de réacteur, mais varie axialement, entre l'entrée et la sortie.



**Figure 3.7 Réacteur à écoulement piston**

Dans cette tranche de faible épaisseur, on peut supposer que les concentrations sont uniformes, avec une évolution axiale de la conversion.

La résolution du bilan passe par l'écriture à l'échelle locale :

1. On définit un élément de volume  $dV$  dans lequel on considère  $C_i$  homogène.
2. On écrit le bilan de matière dans cet élément.
3. On intègre sur l'ensemble du réacteur en fonction des données connues

Ecrivons le bilan sur  $i$  et sur la tranche  $dV$  :

$$E + P = S$$

$$F_i + R_i dV = F_i + dF_i$$

$$R_i dV = dF_i \quad (3.41)$$

Pour une réaction unique:  $v_i r dV = dF_i \quad (3.42)$

Soit :  $v_i r dV = d(QC_i) \Rightarrow v_i r dV = v_i Q C_0 dX$

$$r dV = F_0 dX$$

$$V = F_0 \int_0^X \frac{dX}{r} = Q C_0 \int_0^X \frac{dX}{r} \quad (3.43)$$

$F_i$  et  $F_i + dF_i$  sont les flux en entrée et sortie de tranche  $dV$

### Equations caractéristiques (aux avancements)

$$(3.41) \Rightarrow \sum_{j=1}^{NR} v_{ij} r_j \cdot dV = dF_i \Rightarrow \sum_{j=1}^{NR} v_{ij} r_j = \frac{dF_i}{dV} \quad (3.44)$$

Pour une réaction unique :

$$(3.42) \Rightarrow v_i r = \frac{dF_i}{dV}, \quad \text{avec } F_i = F_{i0} + v_i F_0 X$$

On obtient :

$$\frac{r}{F_0} = \frac{dX}{dV} \quad (3.45)$$

### La variation du débit volumique du mélange réactionnel

S'il y'a lieu des dilatations, l'expression de  $Q$  est :

$Q = \beta Q_0(1 + \alpha X)$  pour une réaction à stœchiométrie unique

$Q = \beta Q_0(1 + \sum_j \alpha_j X_j)$  pour une réaction à stœchiométrie multiple

**Le temps de passage  $\tau$ :** On a  $\tau = V/Q_0$

$$(3.43) \Rightarrow \frac{V}{Q_0} = C_0 \int_0^X \frac{dX}{r} \Rightarrow \tau = C_0 \int_0^X \frac{dX}{r} \quad (3.46)$$

**Le temps de séjour  $t_s$ :**

$$\frac{dV}{Q} = dt_s$$

$$\frac{r}{F_0} = \frac{dX}{dV} \Rightarrow t_s = F_0 \int_0^X \frac{dX}{Q r} = Q_0 C_0 \int_0^X \frac{dX}{\beta Q_0(1+\alpha X) r}$$

$$\Rightarrow t_s = C_0 \int_0^X \frac{dX}{\beta(1+\alpha X) r} \quad (3.47)$$

Remarque : si  $Q$  ne varie pas  $t_s = \tau$

### 3.3.5. Récapitulation des résultats de Bilans

Le tableau suivant regroupe les résultats trouvés dans les paragraphes précédents après l'application des équations de bilans sur les réacteurs idéaux.

**Tableau 3.1- Réacteur idéaux : équations de bilan, équations caractéristiques**

Type de réacteur idéal	RF	RCPA	RP
Bilan des constituants	$V \sum_{j=0}^m v_{ij} r_j = \frac{dn_i}{dt}$	$\sum_{j=1}^{NR} v_{ij} r_j = \frac{F_{is} - F_{ie}}{V(t)}$	$\sum_{j=1}^{NR} v_{ij} r_j = \frac{dF_i}{dV}$
Equations caractéristiques (aux avancements)	$r_j = \frac{n_0}{V} \frac{dX_j}{dt}$	$\frac{X}{V} = \frac{r}{QC_0}$	$\frac{r}{F_0} = \frac{dX}{dV}$
Temps de passage $\tau$	-----	$\tau = C_0 \frac{X}{r}$	$\tau = C_0 \int_0^X \frac{dX}{r}$
Temps de séjour $t_s$	$t_s = n_0 \int_0^{X_j} \frac{dX_j}{V r_j}$	$t_s = \frac{C_0 X}{V r}$	$t_s = C_0 \int_0^X \frac{dX}{\beta(1 + \alpha X) r}$
Volume : $V$ . Débits volumiques : $Q$	$V = \beta V_0 \left( 1 + \sum_j \alpha_j X_j \right)$	$Q = \beta Q_0 \left( 1 + \sum_j \alpha_j X_j \right)$	$Q = \beta Q_0 \left( 1 + \sum_j \alpha_j X_j \right)$