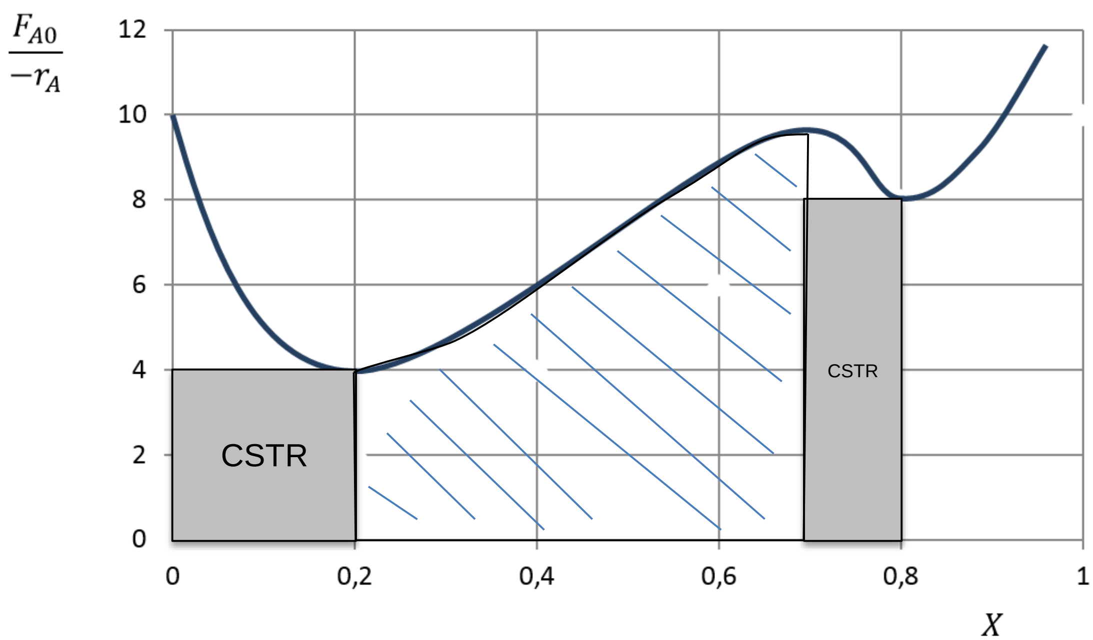
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL
DÉPARTEMENT DE GÉNIE CHIMIQUE
GCH3110 - CALCUL DES RÉACTEURS CHIMIQUES
CONTRÔLE PÉRIODIQUE #1
AUTOMNE 2015

Section 1 – Questions rapides
Pour les questions à choix multiples, vous pouvez choisir plusieurs réponses.
Expliquez chacune de vos réponses

Question 1 (1 point)

Une réaction irréversible en phase liquide a lieu dans un réacteur en continu. Un flux équimolaire de A et B est alimenté au réacteur isotherme. Donnez la suite de réacteur (CSTR ou PFR) en série qui minimise le volume total pour atteindre une conversion de 80% :



Veuillez choisir parmi ces réponses :

a) Un CSTR de 0 à 20% de conversion et un PFR de 20% à 80% de conversion.
b) Un PFR de 0 à 20% de conversion et un CSTR de 20% à 80% de conversion.
c) Un CSTR de 0 à 20% de conversion, un PFR de 20% à 70% de conversion et un CSTR de 70% à 80% de conversion.
d) Un PFR de 0 à 20% de conversion, un CSTR de 20% à 70% de conversion et un PFR de 70% à 80% de conversion.

Question 2 (1 point)
Soit un système à l'équilibre. Laquelle des affirmations suivantes permet de décrire ce système?

Veuillez choisir une réponse :

- **a) La réaction directe et la réaction inverse continuent de se produire, mais ne changent pas la concentration des réactifs et des produits.**
- b) La réaction directe seulement continue de se produire.
- c) La réaction directe et la réaction inverse continuent de se produire et changent la concentration des réactifs et des produits.
- d) La réaction directe et la réaction inverse ne se produisent plus.

Question 3 (1 point)
Considérez la réaction en phase gazeuse $\left(A + 2B \leftrightarrow 3C\right)$ dont la vitesse de réaction s'exprime ainsi :

$$-r_A = k\left(\frac{P_A P_B^2}{P_C^3}\right)$$

Que signifie une vitesse de réaction nulle?

- a) La réaction est à l'équilibre.
- **b) L'un des réactifs (A ou B) n'est pas présent dans le milieu réactionnel.**
- c) La réaction est menée dans un système adiabatique.
- d) Le produit (C) n'est pas présent dans le milieu réactionnel.

Question 4 (1 point)
Peut-on avoir une conversion de 100% (réaction complète) dans un réacteur CSTR?

Veuillez choisir une réponse :

- **a) Oui, mais seulement dans le cas d'une réaction d'ordre 0 puisque le débit de sortie du réactif limitant peut être nul.**
- b) Non, car un CSTR est parfaitement mélangé, ce qui fait en sorte que l'alimentation ne peut pas être totalement transformée en produit.
- c) Non, car les vitesses de réaction dépendent de la concentration des réactifs dans le milieu réactionnel.
- d) Oui, car la concentration des réactifs varie dans le réacteur.

Section 2 – Questions à développement
Présentez toutes les traces de vos démarches. Il est important de bien écrire vos équations de conservation, résoudre vos équations et présenter le résultat demandé.

Question 5 (5 points)

Une réaction en phase liquide $A \rightarrow 2B$ se produit dans un PFR de volume V (figure 1). La réaction est de premier ordre, la conversion finale est de 80% et le débit massique est de $10\ kg/h$.

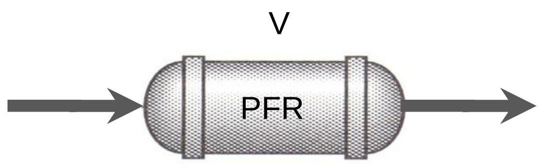


Figure 1

Il faut premièrement déterminer la constante cinétique à l'aide du premier réacteur

$$V = F_{A0}\int_0^X \frac{dX}{-r_A} = F_{A0}\int_0^X \frac{dX}{kC_A} = F_{A0}\int_0^X \frac{dX}{kC_{A0}(1-X)} = \frac{F_{A0}}{kF_{A0}/v_0}\int_0^{0.8} \frac{dX}{(1-X)} = \frac{v_0}{k}\ln\left(\frac{1}{1-X}\right)_0^{0.8}$$

$$k = \frac{v_0}{V}\ln\left(\frac{1}{1-X}\right)_0^{0.8} = \frac{1}{\tau}\ln\left(\frac{1}{1-X}\right)_0^{0.8} = \frac{1}{\tau}\ln\left(\frac{1}{1-0.8}\right) = \frac{\ln(5)}{\tau}$$

$$k = \frac{\ln(5)}{\tau}$$

Si ce PFR est coupé en deux parties et que la première partie est remplacée par un CSTR de volume V/2 (figure 2), quelle est la nouvelle conversion finale?

Pour cette partie, la constante cinétique est la même que précédemment : $k = \frac{\ln(5)}{\tau}$. Seulement le volume dans l'équation de design sera divisé de moitié.

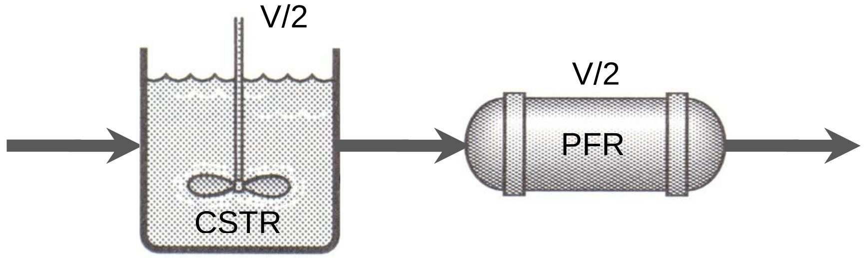


Figure 2

<u>CSTR</u>

$$V_{CSTR} = \frac{V}{2} = \frac{F_{A0}X_{CSTR}}{-r_A} = \frac{F_{A0}X_{CSTR}}{kC_A} = \frac{F_{A0}X_{CSTR}}{kC_{A0}(1-X_{CSTR})} = \frac{F_{A0}X_{CSTR}}{k(F_{A0}/v_0)(1-X_{CSTR})} = \frac{v_0X_{CSTR}}{k(1-X_{CSTR})}$$

$$\frac{V}{2} = \frac{v_0X_{CSTR}}{\left(\frac{\ln(5)}{\tau}\right)(1-X_{CSTR})} = \frac{\tau v_0 X_{CSTR}}{\ln(5)\,(1-X_{CSTR})} = \frac{Vv_0X_{CSTR}}{v_0\ln(5)\,(1-X_{CSTR})}$$

$$\frac{\ln(5)}{2} = \frac{X_{CSTR}}{(1-X_{CSTR})}$$

$$X_{CSTR} = \frac{\ln(5)\,/2}{1+\ln(5)\,/2} = 0.446$$

<u>PFR</u>

$$V_{PFR} = \frac{V}{2} = F_{A1}\int_0^X \frac{dX_{PFR}}{-r_A} = F_{A1}\int_0^X \frac{dX_{PFR}}{kC_A} = F_{A1}\int_0^X \frac{dX_{PFR}}{kC_{A1}(1-X_{PFR})} = \frac{F_{A1}}{kF_{A1}/v_1}\int_0^X \frac{dX_{PFR}}{(1-X_{PFR})} = \frac{v_1}{k}\ln\left(\frac{1}{1-X_{PFR}}\right)$$

Liquide : $v_1 = v_0$

$$\frac{V}{2} = \frac{v_0}{\left(\frac{\ln(5)}{\tau}\right)}\ln\left(\frac{1}{1-X_{PFR}}\right) = \frac{\tau v_0}{\ln(5)}\ln\left(\frac{1}{1-X_{PFR}}\right) = \frac{Vv_0}{v_0\ln(5)}\ln\left(\frac{1}{1-X_{PFR}}\right)$$

$$\frac{\ln(5)}{2} = \ln\left(\frac{1}{1-X_{PFR}}\right)$$

$$X_{PFR} = 1 - \exp\left(-\frac{\ln(5)}{2}\right) = 0.553$$

<u>Conversion finale</u>

$$(1-X_F) = (1-X_{CSTR})(1-X_{PFR})$$
$$X_F = 1-(1-X_{CSTR})(1-X_{PFR})$$
$$X_F = 1-(1-0.446)(1-0.553)$$
$$X_F = 0.75$$

La conversion finale est de $\boldsymbol{X_F = 0.752}$

Question 6 (5 points)
La réaction liquide irréversible élémentaire

$$2A \rightarrow B$$

à lieu dans un réacteur tubulaire isotherme et isobare. Le réactif A et un diluant C sont alimentés dans un rapport équimolaire et la conversion de A est de 80%. Si le débit molaire de A est doublé tout en laissant constant le débit du diluant C, quelle est la conversion de A résultante si le débit volumétrique demeure constant?

Situation #1
Équimolaire : $C_{A0} = C_{I0}$

$$-r_A = kC_A^2 = k\left(\frac{F_A}{v}\right)^2 = \frac{kF_{A0}^2(1-X)^2}{v_0^2} = kC_{A0}^2(1-X)^2$$

$$V = F_{A0}\int_0^X \frac{dX}{-r_A} = F_{A0}\int_0^X \frac{dX}{kC_{A0}^2(1-X)^2} = \frac{F_{A0}}{k(F_{A0}/v_0)^2}\int_0^X \frac{1}{(1-X)^2}dX$$

$$\frac{VkF_{A0}}{v_0^2} = \frac{VkC_{A0}}{v_0} = \int_0^{0.8} \frac{1}{(1-X)^2}dX = \frac{1}{1-X} - 1 = \frac{1}{1-0.8} - 1 = 4$$

Situation #2
$v_0' = v_0$ et $F_{A0}' = 2F_{A0}$, donc $C_{A0}' = 2C_{A0}$

$$-r_A = kC_A'^2 = k\left(\frac{F_A'}{v_0'}\right)^2 = \frac{kF'^2_{A0}(1-X)^2}{v_0^2} = kC'^2_{A0}(1-X)^2$$

$$V = F_{A0}'\int_0^X \frac{dX}{-r_A} = F_{A0}'\int_0^X \frac{dX}{kC'^2_{A0}(1-X)^2} = \frac{F_{A0}'}{k(F_{A0}'/v_0)^2}\int_0^X \frac{1}{(1-X)^2}dX$$

$$\frac{VkF_{A0}'}{v_0^2} = \frac{VkC_{A0}'}{v_0} = \int_0^X \frac{1}{(1-X)^2}dX$$

$$C_{A0}' = 2C_{A0} \implies \frac{Vk(2C_{A0})}{v_0} = 2\left(\frac{VkC_{A0}}{v_0}\right) = 2(4) = 8$$

$$8 = \frac{1}{1-X} - 1$$

$$\boldsymbol{X = 1 - \frac{1}{8+1} = 0.89}$$

Question 7 (6 points)

Considérez un réacteur fermé de forme sphérique dont la paroi est élastique. La pression interne du réacteur varie linéairement en fonction du diamètre $(2\,atm/m)$ quand la réaction suivante à lieu dans le réacteur :

$$A \rightarrow B + C$$

Le volume initial du réacteur est de $4\,L$ et la température est constante et égale à $60°C$.

Initialement, seulement du réactif A est introduit dans le réacteur. La réaction est élémentaire et la constante cinétique est égale à :

$$k = 10^{-3}\,s^{-1}$$

a) (3 points) Déterminez la vitesse de réaction en fonction de la conversion.

$$-r_A = kC_A = k\frac{F_A}{V} = \frac{kF_{A0}(1-X)}{V_0(1+\varepsilon X)\frac{P_0}{P}\frac{T}{T_0}} = \frac{kC_{A0}(1-X)P}{(1+\varepsilon X)P_0}$$

$$\varepsilon = y_{A0}\delta = \left(\frac{F_{A0}}{F_{T0}}\right)(1+1-1) = (1)(1) = 1$$

$$P_0 = \frac{D_0}{2}\ et\ P = \frac{D}{2}$$

$$-r_A = \frac{kC_{A0}(1-X)2D}{(1+X)2D_0} = \frac{kC_{A0}(1-X)D}{(1+X)D_0}$$

b) (3 points) Quand le volume du réacteur double, quelle est alors la conversion de A?

Diamètre initial : $V_1 = \frac{4\pi r_0^3}{3} = \frac{4\pi\left(\frac{D_0}{2}\right)^3}{3} = \frac{4\pi D_0^3}{24} = 0.004\,m^3 \;\; => \;\; D_0 = \sqrt[3]{\frac{0.024}{\pi}} = 0.20m$

Diamètre final : $V_2 = 2V_1 = \frac{4\pi r^3}{3} = \frac{4\pi\left(\frac{D}{2}\right)^3}{3} = \frac{4\pi D^3}{24} = 0.008\,m^3 \;\; => \;\; D = \sqrt[3]{\frac{0.048}{\pi}} = 0.25m$

$$V = V_0(1+\varepsilon X)\frac{P_0}{P}\frac{T}{T_0}$$

$$X = \frac{1}{\varepsilon}\left(\frac{V}{V_0}\frac{P}{P_0} - 1\right) = \frac{V}{V_0}\frac{P}{P_0} - 1 = \left(\frac{8}{4}\right)\left(\frac{\frac{D}{2}}{\frac{D}{D_0}}\right) - 1$$

$$X = (2)\left(\frac{D_0}{D}\right) - 1 = (2)\left(\frac{\sqrt[3]{\frac{0.024}{\pi}}}{\sqrt[3]{\frac{0.048}{\pi}}}\right) - 1 = (2)\left(\frac{0.2}{0.25}\right) - 1$$

$$\boldsymbol{X = 0.6}$$

Intégrales utiles

$$\int_0^x \frac{dx}{1-x} = -\ln(1-x) = \ln\left(\frac{1}{1-x}\right)$$

$$\int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{(1-x)^2} = \frac{1}{1-x_2} - \frac{1}{1-x_1}$$

$$\int_0^x \frac{dx}{1+\epsilon x} = \frac{1}{\epsilon}\ln(1+\epsilon x)$$

$$\int_0^x \frac{(1+\epsilon x)dx}{1-x} = -(1+\epsilon)\ln(1-x) - \epsilon x$$

$$\int_0^x \frac{(1+\epsilon x)dx}{(1-x)^2} = \frac{(1+\epsilon)x}{1-x} + \epsilon\ln(1-x)$$

$$\int_0^x \frac{(1+\epsilon x)^2 dx}{(1-x)^2} = 2\epsilon(1+\epsilon)\ln(1-x) + \epsilon^2 x + \frac{(1+\epsilon)^2 x}{1-x}$$

$$\int_0^x \frac{dx}{(1-x)(M-x)} = \frac{1}{M-1}\ln\frac{M-x}{M(1-x)}, M \neq 1$$

$$\int_0^W (1-\alpha W)^{1/2} dW = \frac{2}{3\alpha}\left[1-(1-\alpha W)^{3/2}\right]$$

Racines d'un polynôme du deuxième degré

$$ax^2 + bx + c = 0\ ; x = \frac{-b \pm \sqrt[2]{b^2-4ac}}{2a}$$