

# GCH-2006: Calcul des réacteurs chimiques

- Première rencontre -

Alain Garnier, génie chimique, H13

# Plan

- Introduction
  - Cinétique et catalyse vs Calcul des réacteurs chimiques
  - Plan de cours
  - Calendrier
  - Différents types de réacteur
- Approche
  - Scott Fogler
  - Site web du cours
  - Outils
- Application à différents types de réacteurs (Chap 1 & 3)

# Introduction

- Suite à « cinétique et catalyse » (Chap 3 et 5 de Fogler)
- Importance du calcul des réacteurs
  - Au cœur de la plupart des procédés chimiques
    - 70 000 produits différents
    - Plastiques et polymères: 80% de la production
    - Chiffre d'affaire mondial de 3 trilliards (3E12\$)
    - 1 million d'emplois en Amérique du Nord
  - Considère la réaction chimique dans des conditions réelles:
    - Différents types de réacteurs, pouvant être agencés
    - Multiphasique(s)
    - Effets de la pression, de la perte de charge, de la température, des réactions multiples, du mélange, des phénomènes d'échange
    - Régime transitoire

# Plan de cours



PLAN DE COURS

Hiver 2013

Faculté des sciences et de génie

## GCH-2006 10017 - Calcul des réacteurs chimiques

### Informations générales

Crédits : 3  
Temps consacré : 3-2-4  
Mode d'enseignement : Présentiel  
Site Web : <http://www.gch.ulaval.ca/agarnier/>  
Intranet Pixel : <https://pixel.fsg.ulaval.ca>  
Enseignant(s) : Garnier, Alain [alain.garnier@gch.ulaval.ca](mailto:alain.garnier@gch.ulaval.ca)  
Responsable : à déterminer  
Date d'abandon sans échec avec  
remboursement : 04 Février 2013 à 23h59  
Date d'abandon sans échec sans  
remboursement : 01 Avril 2013 à 23h59

### Description sommaire

Réacteurs homogènes: réacteurs idéaux isothermes, régimes stationnaires et transitoires, réactions simples et réactions composées. Réacteurs non idéaux, distribution des temps de séjour, modèle de dispersion, modèles mixtes. Réacteurs non isothermes. Profils optimaux de température. Bilans thermiques et stabilité des réacteurs. Réacteurs hétérogènes: réacteurs gaz-liquide. Réacteurs gaz-solide non catalytiques. Problèmes choisis en catalyse hétérogène.

### Horaire et disponibilités

Cours en classe :	Lundi	13h30 à 15h20	PLT-2500
	Jeudi	10h30 à 12h20	PLT-2569

### Objectifs

Comme son nom l'indique, ce cours comporte l'étude des principes physiques et chimiques et des techniques mathématiques, mis en œuvre pour réaliser les opérations suivantes :

- Choix du type de réacteur (forme, mode d'alimentation, mode d'agitation);
- Calcul des dimensions du réacteur pour réaliser la conversion voulue d'un débit donné et donc une production donnée par unité de temps;

# Calendrier

GCH-2006: Calcul des réacteurs chimiques

Calendrier du cours, HIVER 2013

Mois	Jour	Matière	Fogler, chapitre
Janvier	21	Introduction, définitions, types de réacteurs et conversion	1, 2
	24	Dimensionnement, série de réacteurs, cinétique et stochiométrie	2, 3
	28	T.D.	1, 2, 3
	31	Conception de réacteur isotherme 1	4
Février	4	Conception de réacteur isotherme 2	4
	7	Conception de réacteur isotherme 3	4
	11	T.D.	4
	14	Réactions multiples 1	6
	18	Réactions multiples 2	6
	21	Réactions multiples 3	7
	25	T.D.	6, 7
	28	Examen partiel	---
Mars	4	Réaction non-isotherme 1	8
	7	Réaction non-isotherme 2	8
	11	Semaine de lecture	---
	14	Semaine de lecture	---

# Types de réacteur

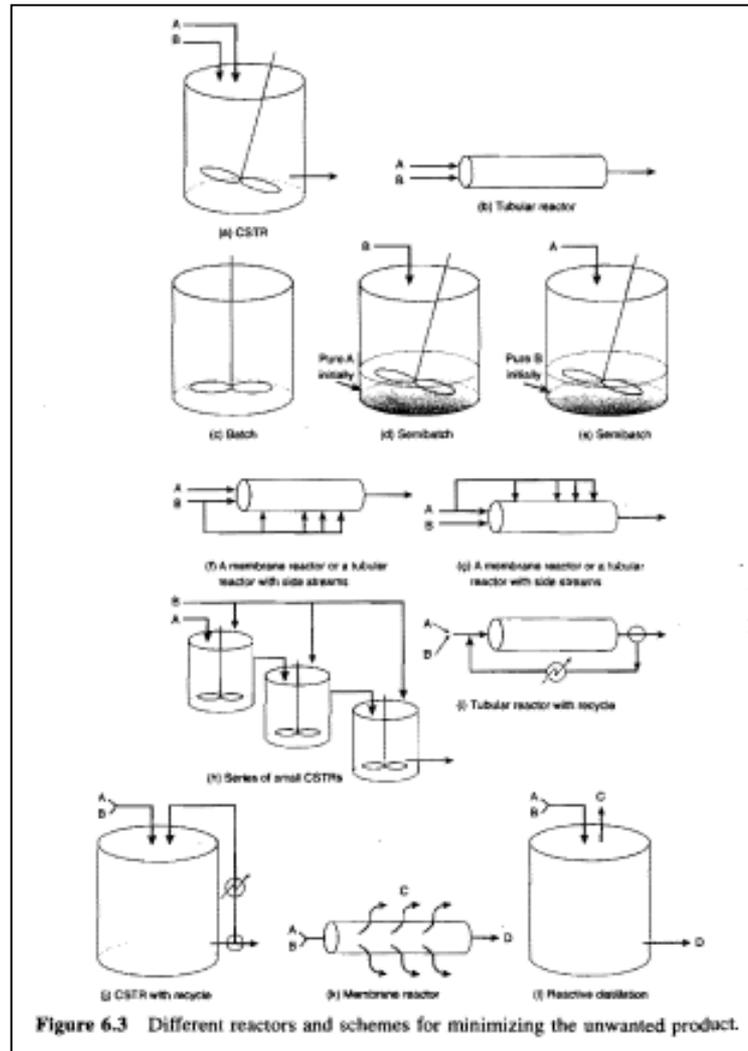


Figure 6.3 Different reactors and schemes for minimizing the unwanted product.

# Approche

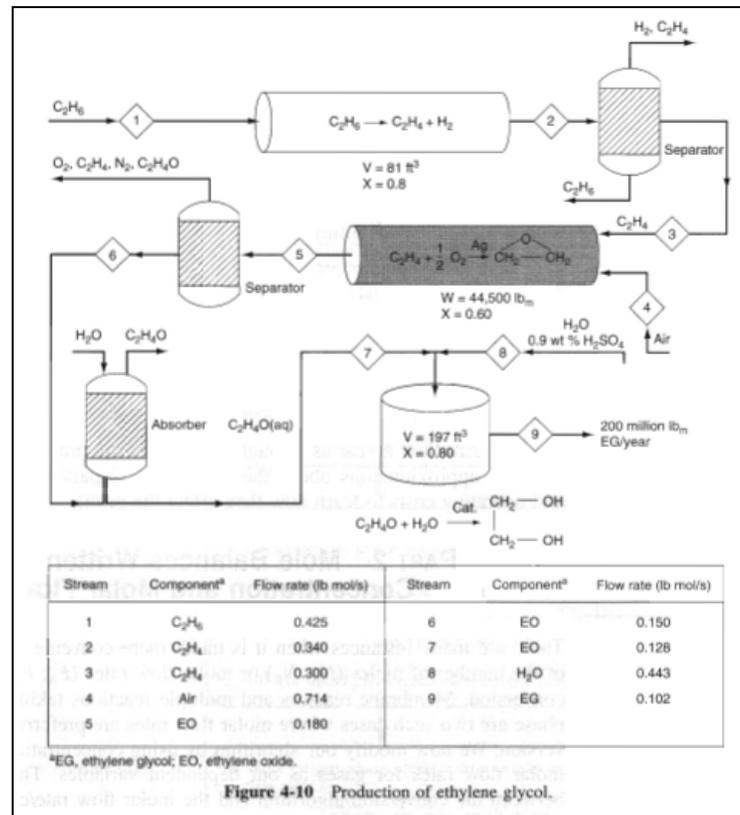
- Scott Fogler: « Elements of Chemical Reaction Engineering », 4<sup>ème</sup> édition, 2006.
  - CD
  - Site web du cours de Scott Fogler:  
<http://www.engin.umich.edu/~cre/>
- Site web du cours GCH-2006:
  - [www.gch.ulaval.ca/agarnier](http://www.gch.ulaval.ca/agarnier)
  - Notes de cours
  - Exercices
  - Devoirs

# Approche

- Outils
  - Scientifiques
    - Bilans (masse, chaleur, quantité de mouvement)
    - Cinétique (Lois de vitesse)
    - Stoechiométrie
  - Résolution de problème
    - Analyse/synthèse
    - Pensée critique
    - Créativité
  - Techniques
    - Algèbre et calcul matriciel
    - Calcul différentiel et intégral
    - Méthodes numériques (différences finies)
    - Excel

# Application à différents types de réacteur

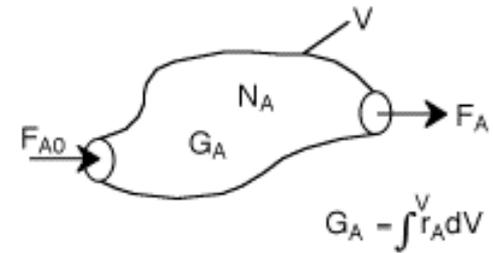
- Exemple, p. 197, Fogler: La production annuelle de 100 000 tonnes/an d'éthylène glycol (EG), en 3 étapes



EG: un marché de 12 Gt/an aux É-U (2000), 26<sup>ème</sup> produit synthétisé.

# Bilan molaire

- $F_{A0}$ : débit molaire entrant de l'espèce A (mole/s)
- $F_A$ : débit molaire (sortant) de l'espèce A (mole/s)
- $N_A$ : nombre de mole de l'espèce A (mole)
- $v$ : débit volumique (L/s)
- $C_A$ : concentration molaire de A (mole/L)
- $x_A$ : fraction molaire de A (mole de A / mole totale)
- $V$ : volume (L)
- $r_A$ : vitesse de génération volumétrique de l'espèce A (mole/L/s)
- $G_A$ : taux de génération de l'espèce A sur le volume considéré (mole /s)

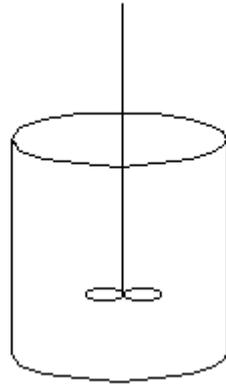


$$G_A = \int_V r_A dV$$

**Bilan molaire:**      Taux d'accumulation      =      Taux d'entrée      -      Taux de sortie      +      Taux de génération

$$\frac{dN_A}{dt} = F_{A0} - F_A + G_A$$

# Réacteur cuvée (batch)

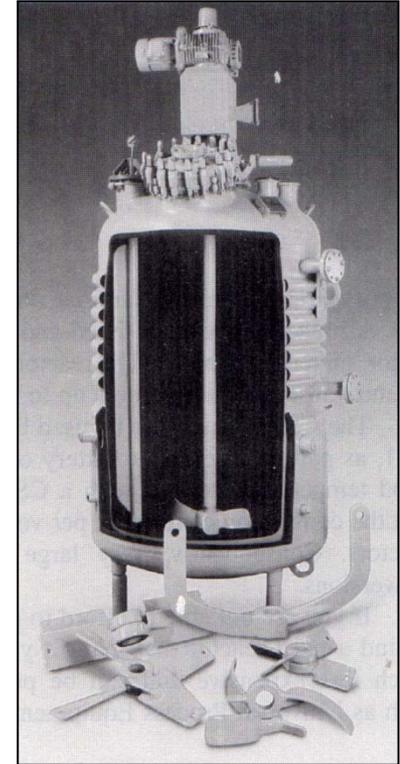


- Hypothèses?
- Développement?

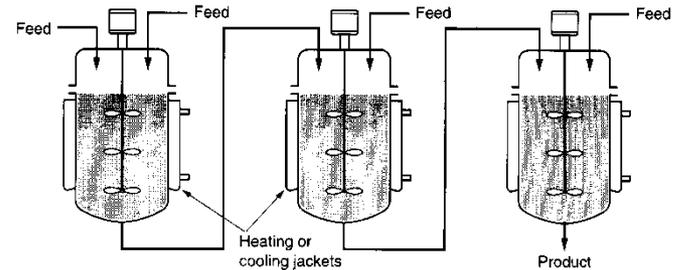
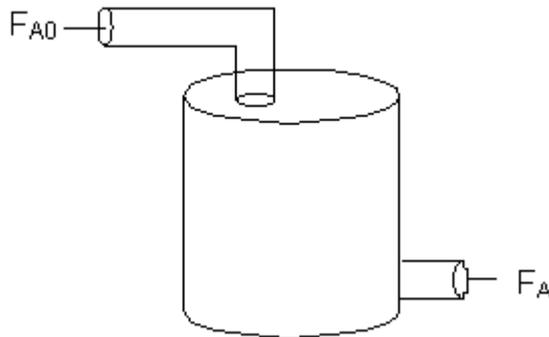
Bilan molaire:

$$\frac{dN_A}{dt} = r_A V$$
$$\frac{dC_A}{dt} = r_A$$

Où  $C_A$ : concentration de A dans le volume V



# Réacteur continu homogène (Continuous Stirred Tank Reactor, CSTR, ou chemostat)



- Hypothèses?
- Développement?

Bilan molaire:

$$V = \frac{F_{A0} - F_A}{-r_A}$$

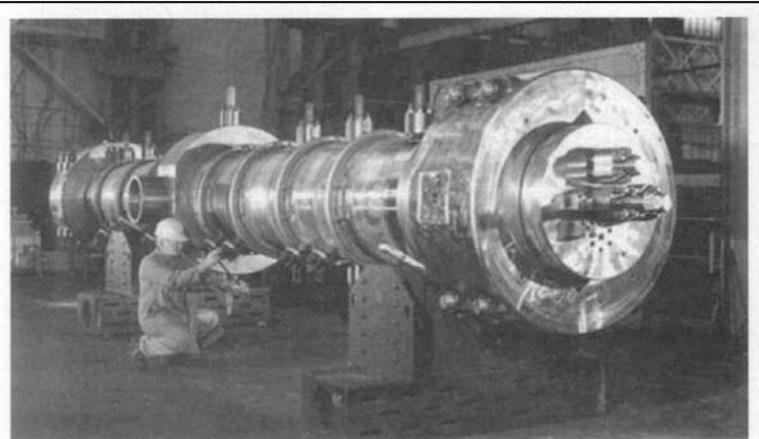
# Réacteur piston (PFR)

- Hypothèses?
- Développement?

Bilan molaire:

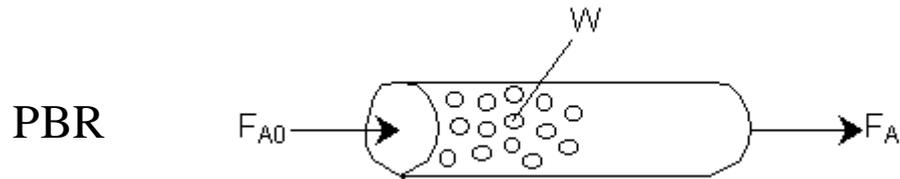
$$\frac{dF_A}{dV} = r_A$$

$$V = \int_{F_{A0}}^{F_A} \frac{dF_A}{r_A}$$



Polyethylene reactor; this 16-in inner-diameter reactor is designed to operate at 35,000 psi and 600°F; in operation, this reactor is in a vertical configuration. Courtesy of Autoclave Engineers, Division of Snap-tite, Inc.

# Réacteur à lit fixe (PBR)



- Hypothèses?
- Développement?

Bilan molaire:

$$\frac{dF_A}{dW} = r_A'$$

$$W = \int_{F_{A0}}^{F_A} \frac{dF_A}{r_A'}$$

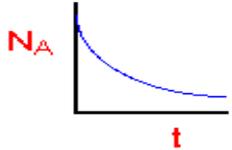
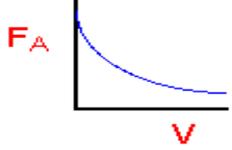
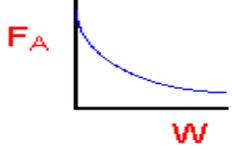
$W$ : masse de catalyseur dans le réacteur (g)

$r_A'$ : vitesse de réaction par masse de catalyseur (mole/g/s)

# Différents réacteurs - synthèse

## 4. Mole Balance on Different Reactor Types (p.25)

The GMBE applied to the four major reactor types (and the general reaction, A->B):

Reactor	Differential	Algebraic	Integral		
<b>Batch</b>	$\frac{dN_A}{dt} = r_A V$		$t = \int_{N_{A0}}^{N_A} \frac{dN_A}{r_A V}$		<a href="#">Derive</a>
<b>CSTR</b>		$V = \frac{F_{A0} - F_A}{-r_A}$			<a href="#">Derive</a>
<b>PFR</b>	$\frac{dF_A}{dV} = r_A$		$V = \int_{F_{A0}}^{F_A} \frac{dF_A}{r_A}$		<a href="#">Derive</a>
<b>PBR</b>	$\frac{dF_A}{dW} = r_A'$		$W = \int_{F_{A0}}^{F_A} \frac{dF_A}{r_A'}$		<a href="#">Derive</a>

# Conversion

- X: fraction du réactif limitant, ou du réactif de référence, qui a réagi

- Cuvée: 
$$X(t) = \frac{N_{A0} - N_A(t)}{N_{A0}} = 1 - \frac{N_A(t)}{N_{A0}}$$

$$N_A = N_{A0}(1 - X)$$

- CSTR, PFR ou PBR:

$$X = \frac{F_{A0} - F_A}{F_{A0}} = 1 - \frac{F_A}{F_{A0}}$$

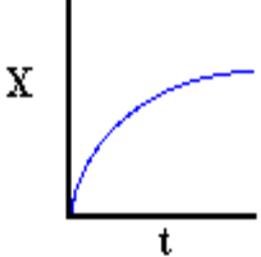
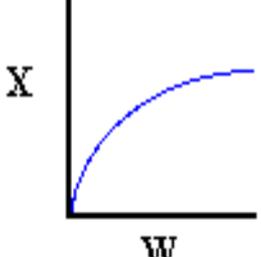
$$F_A = F_{A0}(1 - X)$$

# Inclusion de la conversion dans les bilans molaires

Batch	Continu
$N_A = N_{A0}(1 - X)$	$F_A = F_{A0}(1 - X)$

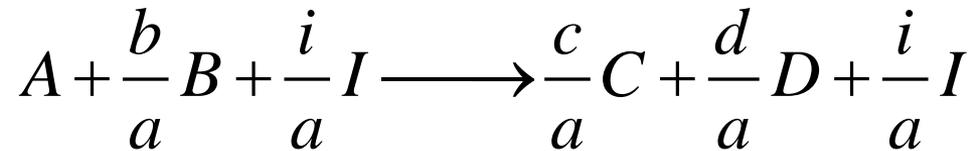
- Batch  $\frac{dN_A}{dt} = r_A V$   $t = \int_{N_{A0}}^{N_A} \frac{dN_A}{r_A V}$
- CSTR  $V = \frac{F_{A0} - F_A}{-r_A}$
- PFR  $\frac{dF_A}{dV} = r_A$   $V = \int_{F_{A0}}^{F_A} \frac{dF_A}{r_A}$

## Reactor Mole Balances in Terms of Conversion (Click on Reactor to see picture)

Reactor	Differential	Algebraic	Integral		
<a href="#"><u>Batch</u></a>	$N_{A0} \frac{dX}{dt} = -r_A V$		$t = N_{A0} \int_0^X \frac{dX}{-r_A V}$	<a href="#">Derive</a>	
<a href="#"><u>CSTR</u></a>		$V = \frac{F_{A0} X}{-r_A}$		<a href="#">Derive</a>	
<a href="#"><u>PFR</u></a>	$F_{A0} \frac{dX}{dV} = -r_A$		$V = F_{A0} \int_0^X \frac{dX}{-r_A}$	<a href="#">Derive</a>	
<a href="#"><u>PBR</u></a>	$F_{A0} \frac{dX}{dW} = -r_A'$		$W = F_{A0} \int_0^X \frac{dX}{-r_A'}$	<a href="#">Derive</a>	

# Chapitre 3: stoechiométrie

- Exemple:



- De manière générale:

$$\frac{r_A}{-a} = \frac{r_B}{-b} = \frac{r_C}{c} = \frac{r_D}{d} \quad r_I = 0$$

# Bilan stoechiométrique en cuvée

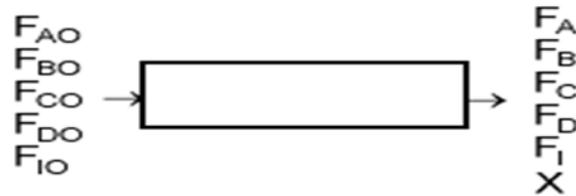
## 1. Batch System Stoichiometric Table (p.101)

<u>Species</u>	<u>Symbol</u>	<u>Initial</u>	<u>Change</u>	<u>Remaining</u>
A	A	$N_{A0}$	$-N_{A0}X$	$N_A = N_{A0}(1-X)$
B	B	$N_{B0} = N_{A0}\Theta_B$	$-\frac{b}{a}N_{A0}X$	$N_B = N_{A0}\left(\Theta_B - \frac{b}{a}X\right)$
C	C	$N_{C0} = N_{A0}\Theta_C$	$+\frac{c}{a}N_{A0}X$	$N_C = N_{A0}\left(\Theta_C + \frac{c}{a}X\right)$
D	D	$N_{D0} = N_{A0}\Theta_D$	$+\frac{d}{a}N_{A0}X$	$N_D = N_{A0}\left(\Theta_D + \frac{d}{a}X\right)$
Inert	I	$N_I = N_{A0}\Theta_I$	-----	$N_I = N_{A0}\Theta_I$
		----- $N_{T0}$		----- $N_T = N_{T0} + \delta N_{A0}X$

$$\Theta_i = \frac{N_{i0}}{N_{A0}} = \frac{C_{i0}}{C_{A0}} = \frac{y_{i0}}{y_{A0}} \quad v_A = -1 \quad v_B = -\frac{b}{a} \quad v_C = \frac{c}{a} \quad v_D = \frac{d}{a} \quad \delta = \frac{d}{a} + \frac{c}{a} - \frac{b}{a} - 1 = \sum_i v_i$$

# Bilan stoechiométrique en système continu

## 2. Flow System Stoichiometric Table (p. 107)



<u>Species</u>	<u>Symbol</u>	<u>Reactor Feed</u>	<u>Change</u>	<u>Reactor Effluent</u>
A	A	$F_{A0}$	$-F_{A0}X$	$F_A = F_{A0}(1-X)$
B	B	$F_{B0} = F_{A0}\Theta_B$	$-\frac{b}{a}F_{A0}X$	$F_B = F_{A0}\left(\Theta_B - \frac{b}{a}X\right)$
C	C	$F_{C0} = F_{A0}\Theta_C$	$+\frac{c}{a}F_{A0}X$	$F_C = F_{A0}\left(\Theta_C + \frac{c}{a}X\right)$
D	D	$F_{D0} = F_{A0}\Theta_D$	$+\frac{d}{a}F_{A0}X$	$F_D = F_{A0}\left(\Theta_D + \frac{d}{a}X\right)$
Inert	I	$F_{I0} = F_{A0}\Theta_I$	-----	$F_I = F_{A0}\Theta_I$
		<hr/> $F_{T0}$		<hr/> $F_T = F_{T0} + \delta F_{A0}X$

$$\Theta_i = \frac{F_{i0}}{F_{A0}} = \frac{C_{i0}v_0}{C_{A0}v_0} = \frac{y_{i0}}{y_{A0}}$$

$$v_A = -1$$

$$v_B = -\frac{b}{a}$$

$$v_C = \frac{c}{a}$$

$$v_D = \frac{d}{a}$$

$$\delta = \frac{d}{a} + \frac{c}{a} - \frac{b}{a} - 1 = \sum_i v_i$$