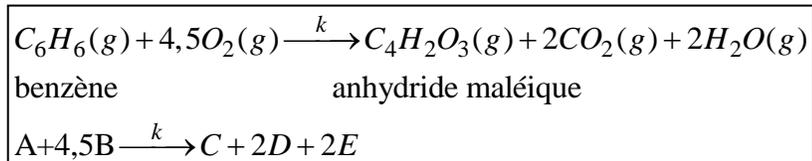


**GCH-2006: CALCUL DES RÉACTEURS CHIMIQUES
HIVER 2013**

Cours #25, 25 avril 2013, **Travaux dirigés**

1. Production d'anhydride maléique

L'anhydride maléique est produit par oxydation du benzène en phase gaz, catalysé par un mélange d'oxydes de vanadium et de molybdène sur un support inerte poreux:



La réaction est menée en excès d'oxygène de sorte qu'elle est de premier ordre par rapport au benzène, avec une constante cinétique:

$$r_A'' = k''C_A, \text{ où } k'' = 3,89E-6 \cdot \exp(10500/8,314/T); r_A'' [=] \text{mole/m}^2/\text{s}; C_A [=] \text{mole/m}^3; T [=] \text{K}$$

Par ailleurs, le catalyseur a les propriétés suivantes: $d_p = 5 \text{ mm}$; $\rho_{CAT} = 2500 \text{ kg/m}^3$; $a = 3E8 \text{ m}^{-1}$; $\epsilon_{CAT} = 0,5$.

On souhaite alimenter un PBR avec un mélange gazeux à 350°C et 11 atm , composé de A et de B, où B est fourni à deux fois la concentration stœchiométrique par un appoint d'air (21% O_2 , 79% N_2). La cible visée est la production annuelle de 40000 tonnes métriques de C avec une conversion de 99%. Le diamètre du PBR est de $0,75 \text{ m}$.

La résistance aux transferts de masse interne et externe ne seront pas négligeables. La diffusivité de A dans l'air est de $D_A = 1,4E-5 \text{ m}^2/\text{s}$ à 25°C et on supposera que la diffusivité effective dans la particule de catalyseur sera moitié moindre que celle dans l'air, $D_{eff} = 0,5 \cdot D_A$. Les propriétés du gaz qui pourraient être nécessaires pour calculer k_c sont la densité, qui pourra être calculée en employant l'équation des gaz parfaits et la viscosité, pour laquelle on pourra supposer que l'écoulement se comporte comme de l'air, avec la relation:

$$\mu = \mu_0 \frac{T_0 + C}{T + C} \left(\frac{T}{T_0} \right)^{3/2}$$

Où $\mu_0 = 1,83E-5 \text{ Pa}\cdot\text{s}$; $T_0 = 291,15 \text{ K}$ et $C = 120$.

Les effets thermiques pourraient également être non-négligeables. On pourrait supposer un réacteur adiabatique, mais négliger le profil de température dans les particules catalytiques. Les données utiles pour calculer cet effet sont: $\Delta H_{RX}^0 = -316836 \text{ J/mole de A}$ à 25°C ; $C_{pA} = 136 \text{ J/mole/K}$; $C_{pB} = 90,7 \text{ J/mole/K}$; $C_{pC} = 111,7 \text{ J/mole/K}$; $C_{pD} = 166 \text{ J/mole/K}$; $C_{pE} = 35,2 \text{ J/mole/K}$; $C_{p_i} (N_2) = 79,6 \text{ J/mole/K}$.

Les effets de perte de charge pourraient également être importants et toutes les données utiles sont fournies pour calculer β_0 et α .

- Calculez la composition et le débit de l'alimentation du réacteur, Ac , δ , ϵ , C_{p0} et ΔC_p .
- Préparer une feuille Excel où, par différences finies, l'évolution de X , T et $\gamma(p/p_0)$ en fonction du volume de réacteur seront suivis.
- Sur la première ligne, calculer successivement: $v(X,T)$, $k'''(T)$ et $k(T)$, $D_A(T)$, D_{eff} , Φ , η_i , u , μ , les F_i , le débit massique total, ρ , Re , Sc , Sh , k_c , G , β_0 , α , dX/dV et dy/dV .
- Simulez le procédé sur un volume total de 1m^3 .
- Évaluez l'effet de la taille des particules et du diamètre du réacteur sur le volume requis pour obtenir 99% de conversion, la perte de charge ainsi que la température de sortie.

2. **Problème 12-11, p. 860, Fogler.** Utiliser l'équation 12-35, p. 831 pour résoudre ce problème.

3. Cinétique d'ordre zéro, limitée par des résistances au transfert de masse interne et externe

Soit une réaction d'ordre zéro en phase liquide, $A \rightarrow B$, catalysée de manière hétérogène dans un réacteur cuvée (batch). La cinétique de disparition du réactif A:

$$r_A'' = -k''C_A \text{ [mole/m}^2 \text{ cat/s; où: } C_A \text{ [M] et } k'' = 3\text{E-7 L/m}^2 \text{ cat/s}$$

Les propriétés du catalyseur sont: $d_p = 3 \text{ mm}$; $a = 2\text{E5 m}^2/\text{L}$; $D_e = 7\text{E-14 m}^2/\text{s}$

Sachant que le coefficient de transfert de masse externe, $k_c = 8\text{E-9 m/s}$, calculer l'évolution de la concentration de réactif A, étant donné sa concentration initiale de 1M.

- Déterminer la concentration de A dans la masse (bulk) au-dessus de laquelle l'efficacité réactionnelle est de 100% (résistance au transfert de masse négligeable).
- Calculer le temps requis pour atteindre cette concentration.
- À partir de ce point, développer une méthode pour estimer l'évolution de la concentration de A et calculer le temps de cuvée qui sera requis pour atteindre une conversion de 95%.
- Selon vous, est-ce que le transfert de masse externe sera éventuellement limitant?