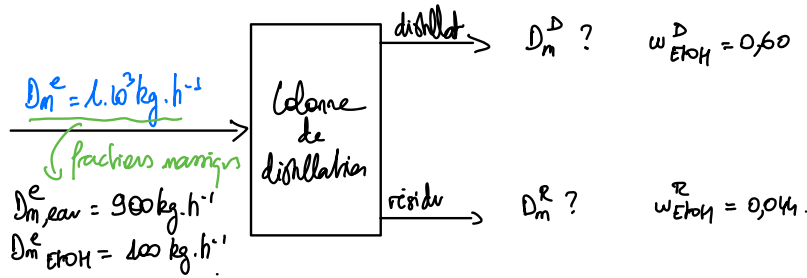




Bilans de matière et d'énergie  
en réacteurs ouverts

1. Bilan d'une distillation fractionnée.

①



Bilan de matière en eau

$$F_{eau}^A = F_{eau}^e + \cancel{J_{eau} \cdot V} - \left( \frac{S_{eau}}{dt} \right)_{\text{accumulé}}$$

*pas de transformation*      *répète stat.*

$$\text{or } F_{eau}^A = F_{eau}^D + F_{eau}^R \quad (\text{flux molaires reliés aux flux marqués})$$

$D_{m,i} = M_i F_i$

$$D_{m,eau}^e = D_{m,eau}^D + D_{m,eau}^R$$

$$w_{eau}^e D_m^e = w_{eau}^D D_m^D + w_{eau}^R D_m^R$$

introduction des fractions marquées

Dans chaque fluide (entrée / résidu / distillat), seuls les espèces eau et éthanol sont présentes (ces mélanges sont binaires)  $\Rightarrow w_{EtOH}^e + w_{eau}^e = 1$ .

$$\text{donc } (1 - w_{EtOH}^e) D_m^e = (1 - w_{EtOH}^D) D_m^D + (1 - w_{EtOH}^R) D_m^R$$

le système à résoudre se alors

$$\begin{cases} 100 = 0,6 D_m^D + 0,044 D_m^R \\ 900 = 0,4 D_m^D + 0,956 D_m^R \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} D_m^D = 100 \text{ kg.h}^{-1} \\ D_m^R = 900 \text{ kg.h}^{-1} \end{cases}$$

②

Attention ! Il n'y a pas de transformation chimique dans la colonne de distillation ... seulement une réaffectation des flux

Bilan de matière en EtOH

$$F_{EtOH}^A = F_{EtOH}^e + \cancel{J_{EtOH} \cdot V} - \left( \frac{S_{EtOH}}{dt} \right)_{\text{accumulé}}$$

*pas de transformation*      *répète stat.*

$$\text{or } F_{EtOH}^A = F_{EtOH}^D + F_{EtOH}^R \quad (\text{flux molaires reliés aux flux marqués})$$

$D_{m,i} = M_i F_i$

$$D_{m,EtOH}^e = D_{m,EtOH}^D + D_{m,EtOH}^R$$

$$w_{EtOH}^e D_m^e = w_{EtOH}^D D_m^D + w_{EtOH}^R D_m^R$$

introduction des fractions marquées

données  $\Rightarrow$  2 inconnues : il faut 2 secondes équation

③ En entrée, 100kg d'éthanol entre par heure.

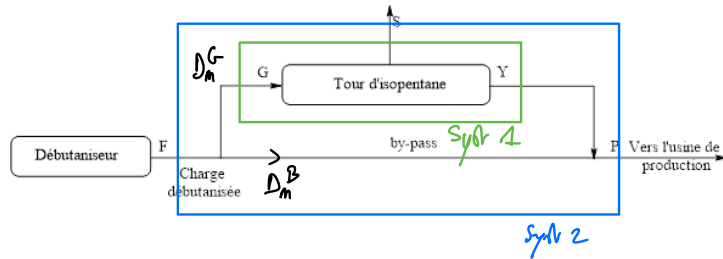
Dans le résidu évaporé à 900 kg.h<sup>-1</sup>, on trouve 4,4% en masse d'éthanol, soit 39,6 kg.h<sup>-1</sup>.

$\Rightarrow$  40% de l'éthanol n'est pas récupéré dans le distillat  
 $\Rightarrow$  le recyclage du résidu s'impose.

(mais le distillat est bien + concentré en éthanol : la fraction marquée en éthanol passe de 10% de la flux d'alimentation à 60% dans le distillat).

## 2 - BILAN DE MATIERE DANS UN BY-PASS.

Deux systèmes ouverts différents vont être étudiés pour réaliser le bilan d'isopentane.



Le système 1 revient à réaliser le bilan d'isopentane au niveau de la tour d'isopentane, dans laquelle il n'y a pas de transformation chimique ( $v_{ip} = 0$ ) et pas d'accumulation en régime stationnaire.

$$F_{ip}^{sortie} = F_{ip}^S + F_{ip}^Y = F_{ip}^G$$

Le fluide en sortie du débutaniseur a la même composition que celle à l'entrée de la tour et dans le by-pass (= retourner orientant le fluide).

En l'absence de transformation chimique, le bilan de matière peut être écrit avec des débits molaux.

$$D_{m,ip}^S + D_{m,ip}^Y = D_{m,ip}^G$$

$$\underbrace{D_{m,ip}^S}_{S = \text{IP pur}} + \underbrace{0}_{Y = \text{NP pur}} = w_{ip}^G \underbrace{D_m^G}_{\text{inconnues.}} \quad (1)$$

Le système 2 revient à considérer l'intégralité du fluide. Le bilan en IP s'écrit :

$$D_{m,ip}^S + D_{m,ip}^P = D_{m,ip}^F$$

$$\underbrace{D_m^S}_{\text{inconnues.}} + w_{ip}^P \underbrace{D_m^P}_{\text{inconnues.}} = w_{ip}^F D_m^F \quad (2)$$

3 inconnues  $\Rightarrow$  il faut une 3<sup>ème</sup> équation.

Bilan en NP pour le système 2 :

$$D_{m,NP}^F = D_{m,NP}^P \quad (\text{NP n'est pas évacué du dispositif. Seul l'excès d'IP est évacué en S.})$$

$$w_{NP}^F D_m^F = w_{NP}^P D_m^P \quad (3)$$

Le système à résoudre s'écrit numériquement

$$\begin{cases} (1) & D_m^S - 0,2 D_m^G = 0 \\ (2) & D_m^S + 0,1 D_m^P = 20 \\ (3) & 0,9 D_m^P = 80 \end{cases}$$

$$\text{On en déduit que } \begin{cases} D_m^P = 89 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1} & (\text{mélange IP/NP}) \\ D_m^S = 11 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1} & (\text{IP pur}) \\ D_m^G = 56 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1} & (\text{mélange IP/NP}) \end{cases}$$

$\Rightarrow$  56% du flux sortant du débutaniseur doit être orienté vers la tour d'isopentane (et 44% dans le by-pass) pour avoir un effluent de composition souhaitée à l'entrée de l'usine de production.

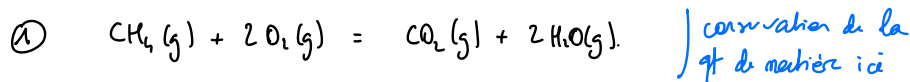
Rq: il est logique que si on injecte  $100 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$  d'IP aux  $100 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$  en F, le flux en P soit réduit de  $100 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$  (soit  $89 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$ ).

Le flux entrant contient  $80 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$  de NP et  $20 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$  de IP. Il sort en P avec  $80 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$  de NP et  $9 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$  de IP.

$\rightarrow$  10% de IP  
90% de NP en sortie.

### 3. COMBUSTION COMPLETE DU METHANE.

$$F_{CH_4}^e = 15 \text{ mol.h}^{-1} \quad F_{O_2}^e = 35 \text{ mol.h}^{-1} \quad F_{H_2O}^e = 5 \text{ mol.h}^{-1}$$



②  $\frac{F_{CH_4}^e}{1} = 15 \text{ mol.h}^{-1} \quad \frac{F_{O_2}^e}{2} = 17,5 \text{ mol.h}^{-1} \Rightarrow CH_4 \text{ limitant.}$

③ Bilan de flux de matière.

	CH <sub>4</sub>	O <sub>2</sub>	CO <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O
$\dot{\zeta} = 0$	$F_{CH_4}^e$	$F_{O_2}^e$	$F_{CO_2}^e = 0$	$F_{H_2O}^e$
$\dot{\zeta}$	$F_{CH_4}^e - \dot{\zeta}$	$F_{O_2}^e - 2\dot{\zeta}$	$\dot{\zeta}$	$F_{H_2O}^e + 2\dot{\zeta}$
X	$F_{CH_4}^e (1-X)$	$F_{O_2}^e - 2XF_{CH_4}^e$	$XF_{CH_4}^e$	$F_{H_2O}^e + 2XF_{CH_4}^e$

avec  $X = \frac{F_{CH_4}^{conv}}{F_{CH_4}^e} = \frac{\dot{\zeta}}{F_{CH_4}^e}$

Pr  $X = 0,80$ ,  $F_{CH_4}^A = 0,2 F_{CH_4}^e = 3 \text{ mol.h}^{-1}$   
 $F_{O_2}^A = F_{O_2}^e - 2 \times 0,8 F_{CH_4}^e = 11 \text{ mol.h}^{-1}$   
 $F_{CO_2}^A = 0,8 F_{CH_4}^e = 12 \text{ mol.h}^{-1}$   
 $F_{H_2O}^A = F_{H_2O}^e + 2 \times 0,8 F_{CH_4}^e = 29 \text{ mol.h}^{-1}$  }  $F_{tot}^A = 55 \text{ mol.h}^{-1}$

Fractions molaires  $x_i^v = \frac{F_i^A}{F_{tot}^A} \Rightarrow$

	CH <sub>4</sub>	O <sub>2</sub>	CO <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O
$x_i^v$	5%	20%	22%	53%

④ Temps totale  $X = 1$

	CH <sub>4</sub>	O <sub>2</sub>	CO <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O	Total
$F_i^A$	0	5	15	35	55 <span style="margin-left: 20px;">(mol.h<sup>-1</sup>)</span>
$x_i^v$	0%	9%	27%	64%	100%

### 4. Bilan de Matière pour une Sr2 en RPAC et Piston

① Tps de passage:  $\tau = V/DV = 150 \text{ s.}$  (2min 30s)

② Tableau de flux

	EtI + HO <sup>-</sup>	=	EtOH + I <sup>-</sup>
$\dot{\zeta} = 0$	$F_{EtI}^e$	$F_{HO}^e$	0 0
$\dot{\zeta}$	$F_{EtI}^e - \dot{\zeta}$	$F_{HO}^e - \dot{\zeta}$	$\dot{\zeta}$ $\dot{\zeta}$

} en mol.s<sup>-1</sup>

$$\frac{F_{EtI}^e}{1} = \frac{F_{HO}^e}{1} \text{ (proportions stoich)}$$

Un mélange initial stoechiométrique reste stoechiométrique.  $F_{EtI}^A = F_{HO}^A$

$$X = \frac{F_{EtI}^{conv}}{F_{EtI}^e} \Rightarrow F_{EtI}^A = F_{EtI}^e (1-X)$$

Bilan de matière en iodéthane

$$F_{EtI}^A = F_{EtI}^e + J_{EtI} - rV - \left(\frac{dn_{EtI}}{dt}\right)^{acc}$$

$$F_{EtI}^e (1-X) = F_{EtI}^e - rV - 0$$

$$F_{EtI}^e X = rV = k [HO^-][EtI] V = k [EtI]^2 V$$

$\uparrow$   
Sr2 = actif elem  
(loi Van't Hoff)

$\uparrow$   
proport. stoich  $\rightarrow$  concentratio de sortie en RPAC

$$F_{EtI}^e X = k \left(\frac{F_{EtI}^e}{DV}\right)^2 (1-X)^2 V$$

$$\leftarrow [EtI] = \frac{F_{EtI}^e}{DV}$$

$$X = k \frac{F_{EtI}^e}{DV^2} (1-X)^2 \tau$$

$$\leftarrow \tau = \frac{V}{DV}$$

$$X = k G (1-X)^2 \tau$$

$$\leftarrow G = [EtI]_0 = \frac{F_{EtI}^e}{DV}$$

$\leftarrow$  et convert de en piston

$$X = kZG_0(1-2X+X^2) \Rightarrow X \text{ solution de } X^2 - \left(2 + \frac{1}{kZG_0}\right)X + 1 = 0$$

Nuérifiquons  $X^2 - 2,3X + 1 = 0$

$$\Rightarrow X = 0,58 : 58\% \text{ de conversion}$$

la concentration d'iodoéthane en sortie est

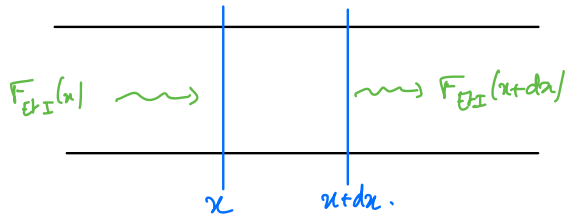
$$C_{\text{EtI}}^D = C_{\text{EtI}}^e (1-X)$$

$$C_{\text{EtI}}^D = 0,42 \text{ mol.l}^{-1}$$

et pour l'alcool

$$C_{\text{EtOH}}^D = 0,58 \text{ mol.l}^{-1}$$

③ Pour le piston, on mène le bilan dans la tranche comprise entre  $x$  et  $x+dx$  (volume  $dV$ ).



Bilan de matière :

$$F_{\text{EtI}}(x+dx) = F_{\text{EtI}}(x) + \downarrow_{\text{EtI}} r dV$$

$$F_{\text{EtI}}^e (1-X(x+dx)) = F_{\text{EtI}}^e (1-X(x)) - r dV$$

$$F_{\text{EtI}}^e dX = r dV$$

$$F_{\text{EtI}}^e dX = k [E_{\text{EtI}}]^2 dV$$

concentration à l'abscisse  $x$ .

$$F_{\text{EtI}}^e dX = k \left( \frac{F_{\text{EtI}}(x)}{dV} \right)^2 dV$$

$$F_{\text{EtI}}(x) = F_{\text{EtI}}^e (1-X)$$

$$F_{\text{EtI}}^e dX = k \left( \frac{F_{\text{EtI}}^e}{dV} \right)^2 (1-X)^2 dV \quad dZ = \frac{dV}{dV}$$

$$\frac{dX}{(1-X)^2} = k G_0 dZ \quad \leftarrow \frac{F_{\text{EtI}}^e}{dV} = G_0$$

Intégration entre l'entrée du réacteur ( $X=0$  et  $dZ=0$ ) et la sortie du réacteur ( $X$  et  $Z$ )

$$\int_0^X \frac{dX}{(1-X)^2} = \int_0^Z k G_0 dZ$$

$$\left[ \frac{1}{1-X} \right]_0^X = k G_0 Z$$

$$\frac{1}{1-X} - 1 = k G_0 Z$$

$$1-X = \frac{1}{1+kG_0Z} \Rightarrow X = 1 - \frac{1}{1+kG_0Z}$$

$$= 1 - \frac{1}{1+0,022 \times 1 \times 150}$$

$$X = 0,76$$

Cette fois,

$$[E_{\text{EtOH}}]_{\text{sortie}} = 0,76 \text{ mol.l}^{-1}$$

le réacteur piston a une conversion supérieure de l'iodoéthane par un même temps de passage qu'un RPA.



## 5- DETERMINATION DE LA TEMPERATURE D'UN REACTEUR.

① Premier principe industriel en régime stationnaire. (On conserve l/).

$$\Delta h = \dot{Q}_h \quad \left| \begin{array}{l} \text{Variation } E_{\text{cine}} \text{ et } E_{\text{pesanteur}} \text{ négligées.} \\ \text{Pas de puissance mécanique.} \end{array} \right.$$

Reste à exprimer  $\Delta h$  correspond à une variation de flux d'enthalpie.

→ contribution chimique :  $\left(\frac{\delta H}{dt}\right)_{\text{chim}} = \frac{F^e X}{C} \Delta H^0 = G_0 D_V X \Delta H^0$   
 ↳ flux molaire de C converti

→ contribution physique  $\left(\frac{\delta H}{dt}\right)_{\text{phys}} = D_m C (T_S - T_e)$  en posant C : capacité thermique massique moyenne du mélange de la réaction.  
 $\approx C_{\text{eau}}$ .

$$D_V [G_0 X \Delta H^0 + \rho C (T_S - T_e)] = \dot{Q}_h$$

② la transformation est exothermique : le fluide réfrigérant a vocation à évacuer l'énergie produite par maintien du réacteur à  $T_e$  cte.

⇒  $\dot{Q}_h < 0$  : le système chimique cède une puissance à l'extérieur.

$$\Rightarrow \dot{Q}_h = hS(T_{\text{paroi}} - T)$$

$$\Rightarrow hS(T_{\text{paroi}} - T) = D_V [G_0 X \Delta H^0 + \rho C (T_S - T_e)] \quad \left. \begin{array}{l} T_S = T \text{ en RPAE} \\ T_{\text{paroi}} = T_e \text{ ici} \end{array} \right\}$$

$$\Rightarrow hS(T_e - T) = D_V G_0 X \Delta H^0 + \rho C D_V (T - T_e)$$

$$\Rightarrow T = T_e - \frac{D_V G_0 X \Delta H^0}{hS + \rho C D_V} \quad \left. \begin{array}{l} \rightarrow J \cdot s^{-1} \\ \rightarrow J \cdot s^{-1} \cdot K^{-1} \end{array} \right\}$$

$$T = 20 + \frac{0,1 \text{ L} \cdot \text{s}^{-1} \times 0,5 \text{ mol} \cdot \text{l}^{-1} \times 0,80 \times 251 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}}{100 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1} \times 0,5 \text{ m}^2 + 10^3 \text{ g} \cdot \text{L}^{-1} \times 4,18 \text{ J} \cdot \text{g}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \times 0,1 \text{ L} \cdot \text{s}^{-1}}$$

$$\underline{\underline{T = 35^\circ\text{C}}}$$

## 6- DESULFURATION D'UN GAZOLE.

① Temps de passage  $\tau = V/D_V \Rightarrow$  on peut faire varier le volume cte du réacteur, mais plus facilement, on peut faire varier le débit d'alimentation.

② Pas de dilatation chimique (ég de  $e^0$  : 3 entrées  $\rightarrow$  3 sorties).

Pas de dilatation physique car  $T = T_e$  et absence de compresseur conduisant à une variation de pression.

③ Le réacteur d'intérêt est RSR : flux entrant  $F_{RSR}^e$ , flux sortant  $F_{RSR}^p = F_{RSR}^e (1-X)$ .

Bilan de matière en RSR entre l'entrée et la sortie du réacteur

$$F_{RSR}^p = F_{RSR}^e + \int_{RSR} r_V - \left(\frac{\delta n_{RSR}}{\delta t}\right)_{\text{accumulation}}$$

régime stationnaire.

$$F_{RSR}^e (1-X) = F_{RSR}^e - r_V$$

$$\Rightarrow F_{RSR}^e X = r_V = k [C_{RSR}]^\alpha V = k \left(\frac{F_{RSR}^e (1-X)}{D_V}\right)^\alpha V$$

$$X = k \tau (1-X)^\alpha \left(\frac{F_{RSR}^e}{D_V}\right)^{\alpha-1}$$

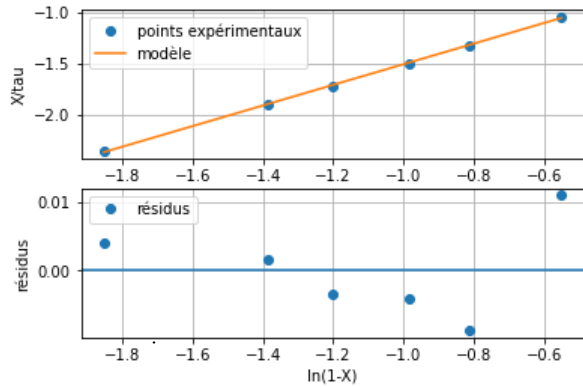
$$\boxed{X = k \tau (1-X)^\alpha [C_{RSR}]_E^{\alpha-1}}$$

↳ concentration  $C_i = \frac{F_i}{D_V}$ .

④ Exploitation d'un tableau de valeurs  $\rightarrow$  régression linéaire.  
 $\Rightarrow$  se fait linéaire l'expression précédente.

$$X = \frac{[C_{RSR}]_E - [RSR]_S}{[C_{RSR}]_E} = 1 - \frac{[RSR]_S}{[C_{RSR}]_E} \quad \text{et} \quad 1-X = \frac{[RSR]_S}{[C_{RSR}]_E}$$

$$\frac{X}{1-X} = \frac{k [C_{RSR}]_E^{\alpha-1}}{\tau} (1-X)^\alpha \Rightarrow \ln\left(\frac{X}{1-X}\right) = \ln(k \tau) + \alpha \ln(1-X)$$



Tendance affine confirmée même si les résidus ne semblent pas aléatoires.

Coef dir : 1,01  $\Rightarrow$   $\alpha=1$

⑤  $X = k\tau(1-X)^\alpha [F_{RSR}]_E^{\alpha-1}$  devient  $X = k\tau(1-X) \Rightarrow X = \frac{k\tau}{1+k\tau}$

Il faut déterminer la valeur de la constante de vitesse  $k$ .

lors de la reformulation linéaire, l'ordonnée à l'origine s'identifie à  $ln k$ .

soit  $ln k = -0,50 \Rightarrow k = 0,6 h^{-1}$

donc  $X = \frac{0,6 \times 1,5}{1 + 0,6 \times 1,5} = 0,48$  pr  $\tau = 1,5h$ .

Cette valeur de  $\tau$  compris entre 1,2h et 2,1h conduit bien à un taux de conversion intermédiaire

à 1,2h,  $X = 1 - \frac{[F_{RSR}]_E}{[F_{RSR}]_E} = 1 - \frac{17,3}{30} = 0,42$

2,1h,  $X = 1 - \frac{13,3}{30} = 0,56$

⑥ Réacteurs de volume  $V/2$  disposés en série. (haussés par le  $\bar{n}$  débit)

Temps de passage par le 1<sup>er</sup> réacteur :  $\tau_1 = \frac{V_1}{Dv} = \frac{V/2}{Dv} = \frac{\tau}{2}$

2<sup>em</sup> réacteur :  $\tau_2 = \tau_1 = \tau/2$

En sortie du 1<sup>er</sup> réacteur,  $F_{RSR}^{S1} = F_{RSR}^e (1-X_1) = F_{RSR}^e \left(1 - \frac{k\tau_1}{1+k\tau_1}\right)$

$F_{RSR}^{S1} = F_{RSR}^e \frac{1}{1+k\tau_1}$

En entrée du 2<sup>nd</sup> réacteur,  $F_{RSR}^{e2} = F_{RSR}^{S1}$

En sortie du 2<sup>nd</sup> réacteur,  $F_{RSR}^{S2} = F_{RSR}^{e2} (1-X_2) = F_{RSR}^e \left(\frac{1}{1+k\tau_1}\right)^2$

Enfin, le flux en sortie de la cascade s'écrit  $X_{global}$  par le réacteur d'intérêt :

$F_{RSR}^{S2} = F_{RSR}^e (1-X_{global})$

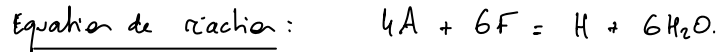
alors  $X_{global} = 1 - \left(\frac{1}{1+k\tau_1}\right)^2$

AN :  $\tau_1 = \frac{\tau}{2} = 0,75h \Rightarrow X_{global} = 1 - \left(\frac{1}{1+0,6 \times 0,75}\right)^2$

$X_{global} = 0,52$

la séparation du réacteur RPAC unique en 2 demi-réacteurs en série fait passer le taux de conversion de 0,48 à 0,52. L'amélioration est ... substantielle.

## 7- SYNTHÈSE DE L'HEXAMÉTHYLENÉTRIAMINE.



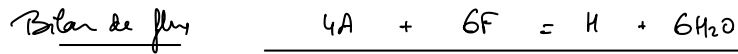
① les deux solutions étant introduites avec le même débit, le mélange revient à diviser les concentrations en entrée par 2.

Flux molaire de A en entrée:  $F_A^e = C_A^e D_v = \frac{C_{A0}}{2} \times 2D_v = 6,09 \text{ mol.l}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$

F:  $F_F^e = C_F^e D_v = \frac{C_{F0}}{2} \times 2D_v = 9,48 \text{ mol.l}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$

A est limitant:  $\frac{F_A^e}{4} < \frac{F_F^e}{6}$

le taux de conversion en A tel que  $F_A^d = F_A^e (1-X)$   $C_A^d = C_A^e (1-X)$



$$\begin{array}{cccc} \dot{j}=0 & F_A^e & F_F^e & 0 \\ \dot{j} & F_A^e - 4\dot{j} & F_F^e - 6\dot{j} & \dot{j} \end{array} \quad \begin{array}{l} \text{solvant} \\ \text{solvant} \end{array}$$

$\Rightarrow X = \frac{4\dot{j}}{F_A^e} \Rightarrow F_F^d = F_F^e - \frac{3}{2} F_A^e X$  et  $F_H^d = \frac{1}{4} F_A^e X$

ou en concentrations:  $C_F^d = C_F^e - \frac{3}{2} C_A^e X$  et  $C_H^d = \frac{1}{4} C_A^e X$

② Bilan en A:  $F_A^d = F_A^e - 4V - \left(\frac{dF_A}{dt}\right)_{acc}$

loi de vitesse  $\left\{ \begin{array}{l} F_A^e X = 4V \\ F_A^e X = 4k[A][F]^2 V \\ C_A^e X = 4kz C_A^e (1-X) \left(C_F^e - \frac{3}{2} C_A^e X\right)^2 \end{array} \right. \quad \left. \begin{array}{l} \text{régime stationnaire.} \\ C_A^e = F_A^e / D_v \text{ et } z = \frac{V}{D_v} \end{array} \right.$

avec les valeurs numériques

$X = 4 \times 1,62 \cdot 10^{-2} \times \frac{500}{3} \times (1-X) (3,16 - 1,5 \times 2,03 X)^2 \Rightarrow X = 0,82$   
Résolution numérique

Concentrations en sortie  $\begin{cases} C_A^d = 0,37 \text{ mol.l}^{-1} \\ C_F^d = 0,66 \text{ mol.l}^{-1} \\ C_H^d = 0,51 \text{ mol.l}^{-1} \end{cases}$

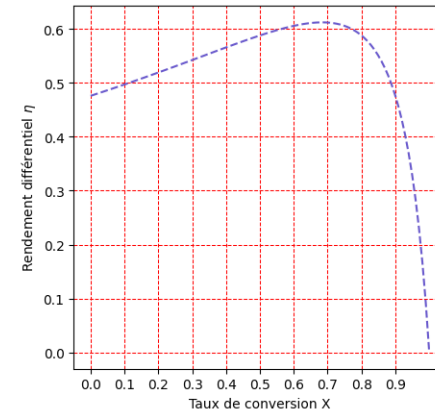
## 8- REACTIONS COMPÉTITIVES.

① Etudions le rapport:  $y = \frac{r_2}{r_1 + r_2 + r_3}$

$y = \frac{k_2[A]}{k_1 + k_2[A] + k_3[A]^2} = \frac{k_2 C_A^e (1-X)}{k_1 + k_2 C_A^e (1-X) + k_3 C_A^e{}^2 (1-X)^2}$

numériquement:  $y = \frac{10(1-X)}{1 + 10(1-X) + 10(1-X)^2} = \frac{1-X}{2,1 - 3X + X^2}$

② Tracé (voir code à la page suivante)



Le flux de sortie de S est maximisé quand  $\frac{dy}{dX} = 0$

$\frac{dy}{dX} = \frac{-2,1 + 3X - X^2 - (1-X)(-3+2X)}{(2,1 - 3X + X^2)^2} = \frac{0,9 - 2X + X^2}{(2,1 - 3X + X^2)^2}$

$\frac{dy}{dX} = 0 \Leftrightarrow X^2 - 2X + 0,9 = 0 \quad (\Delta = 0,4) \Rightarrow X = 0,68$

Code python de recherche automatique du maximum (voir page suivante)

l'avantage du numérique est de pouvoir ici automatiser cette recherche après la modification nouvelle de n'importe quelle valeur des paramètres de l'étude. ( $C_0, k_1, k_2, k_3$ )

```

1 #IMPORTATION DES BIBLIOTHEQUES
2 #=====
3 import matplotlib.pyplot as plt
4 import numpy as np
5
6 #SAISIE DES DONNEES
7 #=====
8 C0 = 1 #Concentration de A à l'entrée en mol/L
9 k1 = 1 #Constante de vitesse de r1 en mol/L/h
10 k2 = 10 #Constante de vitesse de r2 en h^-1
11 k3 = 10 #Constante de vitesse de r3 en L/mol/h
12
13
14 #CREATION DES TABLEAUX DE VALEURS
15 #=====
16 X = np.linspace(0,1,100)
17 rdt = k2*C0*(1-X) / (k1 + k2*C0*(1-X) + k3*C0**2*(1-X)**2)
18
19 #PROCEDURE DE TRACE
20 #=====
21 plt.figure(3, figsize=(5,5), dpi=100)
22 plt.plot(X, rdt, '--', color='slateblue')
23 plt.xlabel('Taux de conversion X')
24 plt.ylabel(r'Rendement différentiel $\eta$')
25 plt.yticks(np.arange(0, .7, .1))
26 plt.xticks(np.arange(0, 1, .1))
27
28
29
30
31 #RECHERCHE DU MAXIMUM
32 #=====
33 for i in range(0, len(rdt)-1):
34     if rdt[i+1] > rdt[i]:
35         imax = i
36
37 print(f'X_max = {round(X[imax], 2)} et rdt_max = {round(rdt[imax], 2)}')

```

③ Tableau de flux :

	A	R	S	I
F <sub>A</sub> <sup>e</sup> - $\dot{V}_1$ - $\dot{V}_2$ - $\dot{V}_3$		$\dot{V}_1$		$\dot{V}_2$
		$\dot{V}_3$		$\dot{V}_4$

Introduction du temps de conversion en A tel q<sup>u</sup> F<sub>A</sub><sup>e</sup> (1-X)

Par identification, 
$$X = \frac{\dot{V}_1 + \dot{V}_2 + \dot{V}_3}{F_A^e}$$

Bilan de matière en A :

$$F_A^D = F_A^e - \underbrace{(r_1 + r_2 + r_3)V}_{\substack{\text{les 3 réactions} \\ \text{consomment A} \\ (\text{nos stoech} = -1)}} - \underbrace{\left(\frac{dn_A}{dt}\right)^{accu}}_{\text{régime stationnaire}}$$

$$F_A^e (1-X) = F_A^e - (k_1 + k_2 [A] + k_3 [A]^2) V$$

$$C_A^e (1-X) = C_A^e - [k_1 + k_2 C_A^e (1-X) + k_3 (C_A^e)^2 (1-X)^2] \tau$$

$F_A^e = \frac{C_A^e}{\tau}$   
et  $\tau = V/Dv$

$$\tau = \frac{C_A^e X}{k_1 + k_2 C_A^e (1-X) + k_3 (C_A^e)^2 (1-X)^2}$$

$$\tau = \frac{0,68}{1 + 10 \times 0,32 + 10 \times (0,32)^2} = 0,13 \text{ h}$$

$\tau \sim 8 \text{ min}$

Le dimensionnement du réacteur par la détermination du temps de passage ou également utile pour contrôler la composition de l'effluent de sortie en cas de voies compétitives de consommation du réactif d'intérêt.

Concentrations en sortie : A est converti à 68%, mais 61% de l'espèce converti a servi à former l'espèce S.

or  $C_A^e = 1 \text{ mol.l}^{-1}$ ,

$$C_A^D = C_A^e (1-X) = 0,32 \text{ mol.l}^{-1}$$

$$C_S^D = C_A^e X = 0,61 \times 0,68 \times 1 = 0,41 \text{ mol.l}^{-1}$$

### 3 - REACTIONS SUCCESSIVES.

① Bilan de matière en A (A n'est consommé qu'par la réaction (1)).

$$F_A^e(1-X) = F_A^e - r_1 V \Rightarrow F_A^e X_A = r_1 V \Rightarrow F_A^e X_A = k_1 F_A^e (1-X) z$$

$$\Rightarrow X_A = \frac{k_1 z}{1+k_1 z} \Rightarrow 1-X_A = \frac{1}{1+k_1 z}$$

donc 
$$F_A^s = F_A^e \frac{1}{1+k_1 z}$$

② Bilan de matière p l'espèce R (formée par (1) et consommée par (2)).

$$F_R^s = F_R^e + r_1 V - r_2 V \Rightarrow F_R^s = 0 + (k_1 [A] - k_2 [R]) V.$$

or,  $[R] = \frac{F_R^s}{Dv} \Rightarrow F_R^s = k_1 [A] V - k_2 F_R^s z$

$$\Rightarrow F_R^s = \frac{k_1 [A] V}{1+k_2 z}$$

or  $[A] = F_A^s / Dv = \frac{F_A^e}{Dv} \frac{1}{1+k_1 z} \Rightarrow F_R^s = F_A^e \frac{k_1 z}{(1+k_1 z)(1+k_2 z)}$

③ Les 2 réactions se font avec conservation de la quantité de matière (1A conduit à 1R et 1R conduit à 1S).  
Le flux molaire total de A, R et S s'identifie donc à  $F_A^e$ .

Proportion de R ds le mélange final:

$$x_R = \frac{F_R^s}{F_{\text{tot}}^s} = \frac{F_R^s}{F_A^e} = \frac{k_1 z}{(1+k_1 z)(1+k_2 z)}$$

P maximiser la proportion de R, on cherche

$$\frac{dx_R}{dz} = 0 \Rightarrow \frac{(1+k_2 z)(1+k_1 z)k_1 - k_1 z [k_1 + k_2 + 2k_1 k_2 z]}{(1+k_1 z)^2 (1+k_2 z)^2}$$

$$1 + (k_1 + k_2)z + k_1 k_2 z^2 - (k_1 + k_2)z - 2k_1 k_2 z^2 = 0$$

$$1 - k_1 k_2 z^2 = 0 \Rightarrow z = \sqrt{\frac{1}{k_1 k_2}} = 0,58 \text{ min}$$

④ La détermination du flux molaire de sortie nécessite seulement de procéder aux applications mathématiques avec  $z = 0,58 \text{ min}^{-1}$ .

$$F_A^s = F_A^e \frac{1}{1+k_1 z} = 3,6 \text{ mol.h}^{-1}$$

$$F_R^s = F_A^e \frac{k_1 z}{(1+k_1 z)(1+k_2 z)} = 4,0 \text{ mol.h}^{-1}$$

$$F_S^s = F_A^e - F_A^s - F_R^s = 2,4 \text{ mol.h}^{-1}$$

le procédé est donc fondamentalement sélectif. Le résultat est cohérent avec des constants de vitesses  $k_1$  et  $k_2$  du même ordre de grandeur.

⑤ Bilan de matière en A dans la tranche de la longueur de réacteur comprise entre les abscisses  $z$  et  $z+dz$ .

$$F_A(z+dz) = F_A(z) - r_1 dV$$

$$F_A^e(1-X(z+dz)) = F_A^e(1-X(z)) - r_1 dV$$

$$F_A^e dX = r_1 dV = k_1 [A] dV = k_1 F_A^e (1-X) \frac{dV}{Dv} = dz$$

$$\boxed{\frac{dX}{dz} = k_1(1-X)}$$

$F_A = [A] Dv$

Résolution de l'équation différentielle

$$\frac{dX}{dz} + k_1 X = k_1 \Rightarrow X = de^{-k_1 z} + 1$$

or  $X(z=0) = 0 \Rightarrow \boxed{X = 1 - e^{-k_1 z}}$

⑥ Bilan de matière en R

$$F_R(z+dz) = F_R(z) + r_1 dV - r_2 dV$$

$$dF_R = k_1 [A] dV - k_2 [R] dV$$

$$= k_1 \frac{F_A^e}{Dv} (1-X) dV - k_2 \frac{F_R}{Dv} dV$$

$$dF_R = k_1 F_A^e e^{-k_1 z} dz - k_2 F_R dz$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{dF_R}{dz} + k_2 F_R = k_1 F_A^e e^{-k_1 z}}$$

La résolution de l'équation différentielle nécessite d'introduire une solution particulière au même format que la 2<sup>e</sup> membre.

$$F_R = \lambda e^{-k_2 z} + \mu e^{-k_1 z} \quad \text{avec } \lambda \text{ et } \mu \text{ à déterminer}$$

*sol<sup>o</sup> homogène    sol<sup>o</sup> particulière*

La solution particulière vérifie l'équation différentielle, donc

$$\frac{dF_R^{\text{part}}}{dz} + k_2 F_R^{\text{part}} = k_1 F_A^e e^{-k_1 z}$$

$$-\mu k_1 e^{-k_1 z} + \mu k_2 e^{-k_1 z} = k_1 F_A^e e^{-k_1 z}$$

$$\Rightarrow \mu = \frac{k_1 F_A^e}{k_2 - k_1}$$

La condition aux limites  $F_R(z=0) = 0$  conduit à  $\lambda + \mu = 0$

$$\Rightarrow F_R(z) = \frac{k_1 F_A^e}{k_2 - k_1} (e^{-k_1 z} - e^{-k_2 z})$$

Terme négatif      Terme qui rend compte de la croissance de la concentration de R aux tps courts ( $k_1 = 3 \text{ min}^{-1}$ )      Rend compte de la décroissance de CR aux temps longs ( $k_2 = 1 \text{ min}^{-1}$ ).

⑦  $F_R$  est maximal quand  $\frac{dF_R}{dz} = 0$

$$0 = -k_1 e^{-k_1 z} + k_2 e^{-k_2 z} \Rightarrow k_1 e^{-k_1 z} = k_2 e^{-k_2 z}$$

$$\Rightarrow \ln\left(\frac{k_1}{k_2}\right) - k_1 z = -k_2 z$$

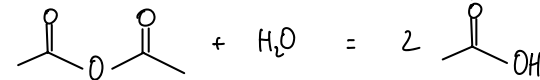
$$\Rightarrow z = \frac{\ln(k_1/k_2)}{k_1 - k_2} = 0,55 \text{ min}^{-1}$$

On en déduit que  $F_R = 5,8 \text{ mol.h}^{-1}$

Par rapport au RPAC, le réacteur piston permet d'améliorer la sélectivité de formation de R, qui représente cette fois 58% au qt de matière du flux sortant, contre 40% de ce RPAC.

## 10 - CASCADE DE RPAC AVEC INCREMENT DE TEMPERATURE.

Equation de R<sup>o</sup> de l'hydrolyse de l'anhydride acétique



symbolisée par  $A + H_2O = 2P$  dans la suite.

① Au sein du premier RPAC, le bilan de matière conduit sur A donne

$$F_A^e X_1 = r_1 V \Rightarrow X_1 = \frac{k(T_1)z}{1 + k(T_1)z} \quad (\text{cf cours pour une loi de vitesse d'ordre 1}).$$

Le flux molaire de A en sortie de 1<sup>er</sup> réacteur s'écrit donc

$$F_A^{(1)} = F_A^e (1 - X_1) \Rightarrow F_A^{(1)} = F_A^e \frac{1}{1 + k(T_1)z}$$

De façon analogue, en remarquant que les temps de passage sont identiques dans tous les réacteurs ( $\bar{m}$  volume et  $\bar{m}$  débit volumique)

$$F_A^{(2)} = F_A^{(1)} \frac{1}{1 + k(T_2)z}$$

Par récurrence,

$$F_A^A = F_A^{(4)} = F_A^e \prod_{i=1}^4 (1 + k(T_i)z)^{-1}$$

Par définition du taux de conversion de A,  $F_A^A = F_A^e (1 - X)$ , il vient:

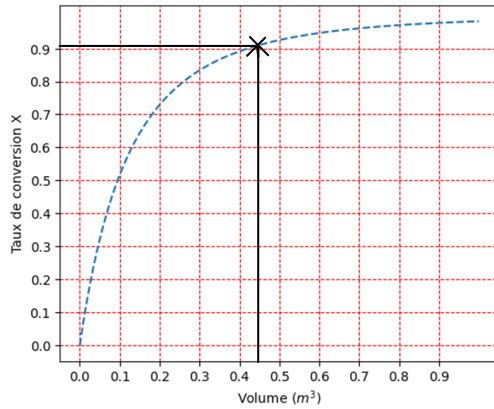
$$X = 1 - \prod_{i=1}^4 (1 + k(T_i)z)^{-1}$$

②

```

37 #Recherche du volume adapté
38 #-----
39 def equation(V):
40     return X(V) - 0.91 #équation à résoudre X - 0.91 = 0
41 V_optimal = bisect(equation,0,1)
42 print(f'Volume optimal = {round(V_optimal,2)}')
```

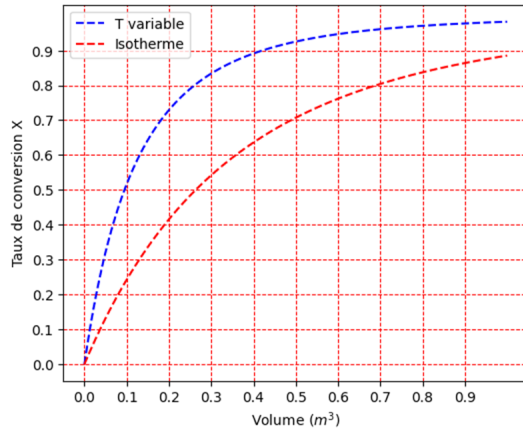
Il suffit de chercher la racine de l'équation  $X = 0,91 \Rightarrow X - 0,91 = 0$  le volume obtenu ( $V = 0,45 \text{ m}^3 \rightarrow 450 \text{ L}$ ) est cohérent avec le tracé de la page suivante.



③ Dans le cas où les réacteurs successifs fonctionnent à la même température, le taux de conversion global s'écrit plus simplement.

$$X = 1 - \left( \frac{1}{1+kz} \right)^4$$

La superposition des courbes dans le cas isotherme (température de 20°C) et dans le cas d'un écoulement de température variable d'intensité d'un chauffage profond (cette option étant utile pour les derniers réacteurs puisque ceux-ci sont alimentés par un flux moins riche en réactif, la transformation s'y déroule donc moins vite).



## 1.1 - POINT DE FONCTIONNEMENT.

① Bilan de matière par loi de vitesse d'ordre 1  $X_{bm}(T) = \frac{k(T)z}{1+k(T)z}$

$$X_{bm}(T) = \left( 1 + \frac{1}{k_0 z e^{-E_a/RT}} \right)^{-1} \leftarrow \text{loi d'Arrhenius.}$$

Bilan d'énergie par le réacteur avec.  $Q_m \Delta h = P_{th}$

$$F_A e X \Delta h^0 + \rho D v c (T - T_e) = h S (T_0 - T)$$

vérification : si  $T > T_{par}$ , le système cède un transfert thermique à l'extérieur :  $P_{th} < 0$ .

$$\Rightarrow X_{bc}(T) = \frac{1}{\frac{F_A e \Delta h^0}{\rho D v c}} \left[ h S (T_0 - T) + \rho D v c (T_e - T) \right]$$

$\hookrightarrow \rho D v c / M$  et  $S = 4\pi r^2 = \pi \phi^2$

② Il convient ici de superposer la droite  $X_{bc} = f(T)$  issue du bilan d'énergie par les 3 températures d'entrée envisagées.

$$\frac{M}{\rho D v \Delta h^0} = \frac{146 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}}{900 \text{ g} \cdot \text{L}^{-1} \times \frac{3}{3600} \text{ L} \cdot \text{s}^{-1} \times 1700 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}} = -1,3 \cdot 10^{-3} \text{ W}^{-1}$$

$$h S = 80 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1} \times 3,14 \times 0,1^2 \text{ m}^2 = 2,5 \text{ W} \cdot \text{K}^{-1}$$

$$\rho c = 900 \text{ g} \cdot \text{L}^{-1} \times \frac{3}{3600} \text{ L} \cdot \text{s}^{-1} \times 2,1 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{g}^{-1} = 1,6 \text{ W} \cdot \text{K}^{-1}$$

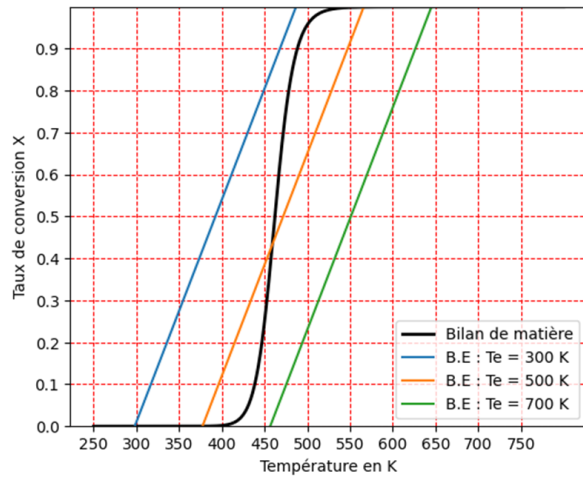
$$X_{bc}(T) = -1,3 \cdot 10^{-3} \left( 2,5 (293 - T) + 1,6 (T_e - T) \right)$$

$$X_{bc}(T) = -0,95 - 2,1 \cdot 10^{-3} T_e + 5,3 \cdot 10^{-3} T$$

$$p \quad T_e = 300 \text{ K} \rightarrow X_{bc}(T) = -1,58 + 5,3 \cdot 10^{-3} T$$

$$T_e = 500 \text{ K} \rightarrow X_{bc}(T) = -2 + 5,3 \cdot 10^{-3} T$$

$$T_e = 700 \text{ K} \rightarrow X_{bc}(T) = -2,42 + 5,3 \cdot 10^{-3} T$$



* $T_e = 300 \text{ K}$	1 pt de fonctionnement :	295 K	$X = 1 \cdot 10^{-10}$
* $T_e = 500 \text{ K}$	3 pts de fonctionnement :	373 K	$X = 6 \cdot 10^{-5}$
		460 K	$X = 0,46$
		561 K	$X = 0,999$
* $T_e = 700 \text{ K}$	1 pt de fonctionnement	639 K	$X = 1,0$

On note qu'ici, bien que la transformation soit exothermique, la  $T$  du point de fonctionnement est inférieure à la  $T$  d'entrée en raison de l'évacuation d'énergie par le transfert conducto-convection mis en place.

① Le point de fonctionnement est stable si le système peut absorber plus d'énergie que la transformation chimique n'en libère.

En différenciant le bilan d'énergie précédemment écrit, cela se traduit lors d'une variation infinitésimale  $dX$  du taux de conversion associée à une variation  $dT$  de température :

$$(\rho D_v c + hS) dT \geq -F_A^e \Delta_r H^0 dX$$

$$\frac{dT}{dX} \leq -\frac{\rho D_v c + hS}{F_A^e \Delta_r H^0}$$

$\Rightarrow$  le coefficient directeur de la tangente à la courbe  $X_{lm}(T)$  doit être inférieur au coefficient directeur de la courbe  $X_e(T)$ .

Le point de fonctionnement intermédiaire correspond à  $T_e = 500 \text{ K}$  et par conséquent instable.

④ Il s'agit de modifier l'écart du bilan d'énergie, notamment l'expression du flux molaire entrant du réacteur nécessairement abaissé suite à la dilution.

$$F_A^e X \Delta_r H^0 + (\rho D_v c (T - T_e)) = hS(T_0 - T)$$

Dans la 1<sup>ère</sup> partie, le flux molaire entrant a été exprimé en considérant que l'espèce A était pure. ( $F_A^e = \frac{\rho D_v}{M}$ )

$$\text{Cette fois, } F_A^e = C_A^e D_v$$

Connaissant la valeur de  $X$ ,  $T_e$  et  $T$ , il suffit d'isoler  $C_A^e$ .

$$C_A^e = \frac{hS(T_0 - T) + \rho c D_v (T_e - T)}{X \Delta_r H^0 D_v} \approx 6 \text{ mol.l}^{-1}$$

$$\left( \frac{30 \text{ W.m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1} \times \pi \times 0,01 \text{ m} \times (293 - 550) \text{ K} + 900 \text{ g.l}^{-1} \times 2,1 \text{ J.K}^{-1} \cdot \text{g}^{-1} \times \frac{3}{3600} \text{ L.s}^{-1} \times (500 - 550) \text{ K}}{0,98 \times (-150,16^?) \text{ J.mol}^{-1} \times \frac{3}{3600} \text{ L.s}^{-1}} \right)$$



## 12 - EFFET THERMIQUE AVEC DEUX REACTIONS CONSECUTIVES

Bilan de matière (on note q'il y a conservation globale de la qt de matière, et donc du flux molaire, avec les réactions envisagées).

	A	R	S
$\dot{z}=0$	$F_A^e$	0	0
$\dot{z}$	$F_A^e - \dot{z}_1$	$\dot{z}_1 - \dot{z}_2$	$\dot{z}_2$

Par conservation du flux molaire (Attention, ce cas n'est pas général, étudier les équations de réaction).

$$F_A^e = F_A^s + F_R^s + F_S^s$$

$$C_A^e = C_A^s + C_R^s + C_S^s$$

conservation du débit volumique  $D_v^e = D_v^s$

On déduit ainsi la concentration de sortie manquante :  $C_A^s = 1 \text{ mol.l}^{-1}$

En évolution adiabatique, l'énergie produite par les transformations chimiques est absorbée par le milieu réactionnel qui monte en  $T$ .

$$\dot{z}_1 \Delta_r H_1^\circ + \dot{z}_2 \Delta_r H_2^\circ + \rho c D_v (T_s - T_e) = 0$$

Analyse en (valeurs abs.)  
 Puissance produite par la temp  $X$   
 puissance absorbée.

$$\dot{z}_2 = F_S^s = C_S^s D_v$$

$$\dot{z}_1 = F_A^e - F_A^s = (C_A^e - C_A^s) D_v$$

$$\Rightarrow (C_A^e - C_A^s) \Delta_r H_1^\circ + C_S^s \Delta_r H_2^\circ + \rho c (T_s - T_e) = 0$$

$$\Rightarrow T_s - T_e = - \frac{(C_A^e - C_A^s) \Delta_r H_1^\circ + C_S^s \Delta_r H_2^\circ}{\rho c}$$

)  $J.L^{-1}$   
 )  $J.L^{-1}.K^{-1}$

$$\Rightarrow T_s - T_e = 60K$$

## 13 - EFFET THERMIQUE EN REACTEUR PISTON

① On réalise un bilan de matière par l'espèce A dans la tranche de réacteur piston compris entre les abscisses  $z$  et  $z+dz$  (volume  $dV$ ).

$$F_A(x+dx) = F_A(x) - r dV \Rightarrow F_A^e dx = -r dV \Rightarrow F_A^e dx = k[A] dV$$

$$\text{or, } [A] = \frac{F_A(x)}{D_v} \text{ donc } dx = k(1-x) dz$$

$$\boxed{\frac{dx}{dz} = k(1-x)}$$

intégration impossible car  $k \neq \text{cte}$  ( $k$  dépend de  $T$  qui dépend de  $z$ )

② Bilan d'énergie au sein de la tranche d'épaisseur  $dz$  en condition adiabatique  $P_H = 0$

$$\Delta_r H^\circ d\dot{z} + \rho c D_v dT = 0$$

$$F_A^e dx \Delta_r H^\circ + \rho c D_v dT = 0$$

$$\frac{dT}{dx} = - \frac{C_A^e \Delta_r H^\circ}{\rho c} = dt = J$$

$$\Rightarrow F_A^e = C_A^e D_v$$

$$J = - \frac{C_A^e \Delta_r H^\circ}{\rho c} = 95 K$$

$$\frac{dT}{dz} = \frac{dT}{dx} \frac{dx}{dz} \Downarrow$$

$$\boxed{\frac{dT}{dz} = k(T) J (1-x)}$$

représente la variation maximal de  $T$  en cond° adiab par 1 conversion totale de A.

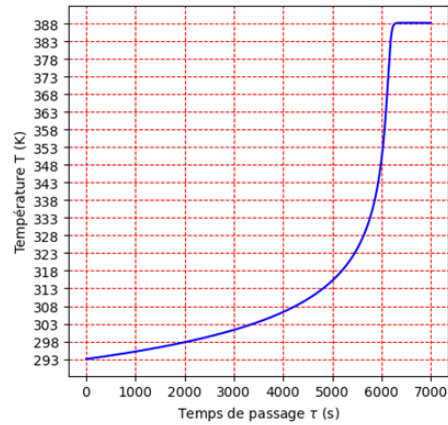
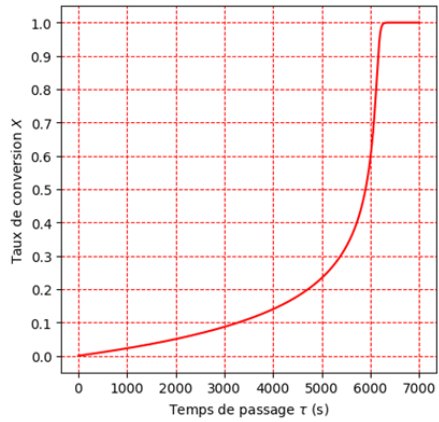
③

```

20 #Définition de fonctions
21 #-----
22 def k(T) :
23     #calcule la constante de vitesse à T
24     return k0 * np.exp(-Ea/R/T)
25
26 def f(Z,tau) :
27     #définit les dérivées de X et T par rapport à tau
28     X,T = Z
29     return k(T) * (1-X) , J * k(T) * (1-X)
    
```

Il suffit de saisir en ligne 24, la loi d'Arrhenius et en ligne 29, les dérivées de  $\frac{dx}{dz}$  et  $\frac{dT}{dz}$  qui seront intégrées grâce à odeint.

④



1<sup>er</sup> constat - la transformation est terminée par 1 temps de passage d'environ  $6 \cdot 10^3$  s.  
 - quand le temps de conversion n'évolue plus, la température non plus n'évolue plus.

2<sup>em</sup>e constat - les évolutions sont de même allure, ce qui est cohérent avec la proportionnalité entre les 2 séries.

3<sup>em</sup>e constat - plus la température augmente, plus le temps de conversion augmente rapidement ce qui est cohérent avec l'effet catalytique de T.

4<sup>em</sup>e constat - si le réacteur est trop court, on ne convertit quasiment pas le réactif.  
 - Inversement, il ne sert à rien d'augmenter infiniment la longueur du réacteur pileux. Quand la transformation est terminée, elle est terminée.

5<sup>em</sup>e constat - l'AN de J donnait 95K: c'est bien l'augmentation de température constatée pour une conversion totale du réactif.

(on peut dès lors se demander si la modélisation par 1 unique réaction chimique reste valable par 1 telle augmentation).

## 14. REALISATION D'UNE ACETALISATION

Par hypothèse de conservation de débit volumique en phase condensée,  
 $D_V = 2D_V^i$ .

D'autre part  $C_A^0 = \frac{C_A^i D_V^i}{D_V} = \frac{C_A^i}{2}$  et  $C_B^0 = \frac{C_B^i}{2}$

A et B ne sont pas introduits dans les proportions stoechiométriques. A est en excès, B est limitant. On définit ici le temps de conversion en référence à cette espèce chimique

$$X = \frac{\dot{J}}{F_B^e} \Rightarrow F_B^a = F_B^e (1-X)$$

Tableau de flux

	A	+ B	=	C	+ D.
$\dot{J}=0$	$F_A^e$	$F_B^e$		0	0
$\dot{J}$	$F_A^e - \dot{J}$	$F_B^e - \dot{J}$		$\dot{J}$	$\dot{J}$
	$F_A^e - F_B^e X$	$F_B^e (1-X)$		$F_B^e X$	$F_B^e X$

Bilan de matière en espèce B

1) B consommé par la réaction en sens direct et produit par celle en sens inverse.

$$F_B^a = F_B^e - r_{\text{direct}} V + r_{\text{inverse}} V$$

$$F_B^e (1-X) = F_B^e - k_1 [A][B] V + k_{-1} [C][D]$$

$$F_B^e X = (k_1 [A][B] - k_{-1} [C][D]) V$$

$$C_B^0 D_V X = \left[ k_1 (C_A^0 - C_B^0 X) C_B^0 (1-X) - k_{-1} C^0 X^2 \right] V$$

$$D_V = \frac{k_1 (C_A^0 - C_B^0 X) (1-X) - k_{-1} C^0 X^2}{X} V$$

AN:  $D_V = 8 \text{ L} \cdot \text{min}^{-1}$  soit  $D_V^i = 4 \text{ L} \cdot \text{min}^{-1}$