

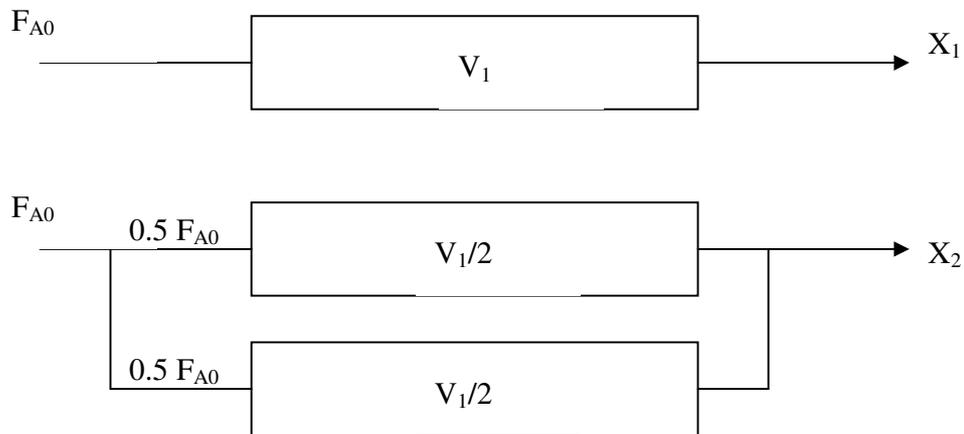
GCH-3110 Calcul des réacteurs chimiques
Contrôle périodique 1

27 septembre 2004
Toute documentation permise
De 10h30 à 12h20

Question 1 (4 points)

Réponses rapides

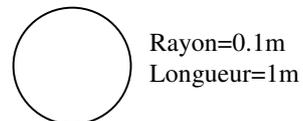
a) Si la conversion X_1 est de 50%, quelle est la conversion X_2 ?



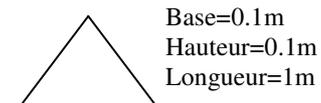
b) Pourquoi est-ce impossible d'atteindre une conversion de 100% dans un CSTR?

c) Pour une réaction élémentaire d'ordre 1 $A \rightarrow B$ en phase liquide, si la conversion du réacteur 1) est de 50%, trouvez la conversion dans le réacteur 2). L'alimentation est constante pour les deux réacteurs.

Réacteur 1)



Réacteur 2)



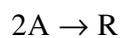
Justifiez vos réponses.

Question 2 (5 points)

Une réaction irréversible d'ordre un $X \rightarrow 3Y$ a lieu dans un réacteur discontinu à une pression constante de 1.8 atm. Si on commence la réaction avec seulement le composant X présent, on remarque que le volume augmente de 70% en 12 minutes. Si la même réaction a lieu à volume constant, quel sera le temps requis pour obtenir une pression de 2.5 atm si la pression initiale est de 1.8 atm?

Question 3 (5 points)

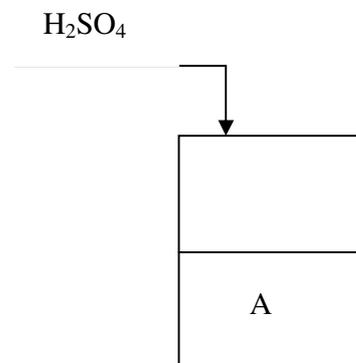
Une réaction



dont la vitesse de réaction est du deuxième ordre ($-r_A = [0.005 \text{ liter}/(\text{mol})(\text{min})] C_A^2$) a lieu à température ambiante et en phase liquide dans un réacteur fermé. La concentration initiale de A est de 1 mol/L. Si le temps de remplissage et de vidangeage est de 18 min, quel est le temps de réaction qui maximalise la production journalière de R? En déduire la conversion optimale et le nombre batch par jour.

Question 4 (6 points)

Une réaction irréversible en phase liquide $A \rightarrow C$ catalysée par la présence d'acide sulfurique est effectuée dans un réacteur isotherme semi-batch parfaitement mélangé. Une solution 2M d'acide sulfurique est alimentée à un débit volumique constant de 5 L/min à un réacteur qui ne contient initialement pas d'acide sulfurique. Le volume initial de A pur dans le réacteur est 100L. La concentration de A pur est 10 mol/L. La réaction est du premier ordre selon A et selon la concentration du catalyseur. Le taux spécifique de réaction est 0.05 L/mol.min. Le catalyseur n'est pas consommé durant la réaction.



- Établir les équations de conservation pour chacune des espèces dans le réacteur.
- Obtenir une solution analytique du nombre de mole de A et la concentration de A en fonction du temps. Quelle est la concentration de A et d'acide sulfurique après 30 minutes ?
- Si la réaction est réversible avec $K_c=2.0$, développer l'équation différentielle de la conversion en fonction du temps et tracer la concentration de A et de C en fonction du temps.
- Qu'arriverait-t-il si on alimentait l'acide sulfurique à la moitié du volume utile du réacteur ?

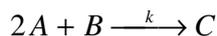
GCH-3110 Calcul des réacteurs chimiques

Contrôle périodique 1

octobre 2005

QUESTION 1 (7 pts)

La réaction suivante est iso-thermique, irréversible et effectuée en phase gazeuse :



Le taux de réaction mesuré en laboratoire se traduit par l'expression:

$$(-r_A) = kC_A^2C_B$$

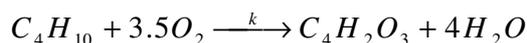
Où $k = 0.3 \text{ l}^2/\text{gmol}^2\text{s}$

- Si les concentrations initiales de A et de B sont respectivement de 0.3 et de 4.7 gmol/l et que le système contient 60% d'inertes (matières non réactives), calculer le temps requis en minute pour atteindre une conversion de 75% dans un réacteur en cuvée (batch) de pression constante.
- Pour un flux volumétrique (q_0) de 3.5 l/min, calculer le volume du réacteur, le temps de séjour et le GHSV (Gas Hourly Space Velocity) nécessaires pour atteindre une conversion de 75% dans un réacteur en écoulement piston (PFR).
- Dériver l'équation de design d'un PFR si les concentrations de C_A et C_B sont égales.

QUESTION 2 (8 pts)

Haldor-Topsoe est une importante compagnie danoise dans les domaines de la catalyse et de l'ingénierie et elle a décidé de se lancer dans le marché du catalyseur VPO. Les améliorations dans la performance des catalyseurs restent improbables, donc ils proposent un nouveau concept de réacteur. Au lieu de charger le réacteur uniformément (avec des particules de diamètre de 2.5 mm), le nouveau design consiste à remplir la première moitié du PFR (réacteur piston) de 50% de catalyseur et de 50% d'inertes et la deuxième moitié de 100% de catalyseur et d'autre part, on augmente la taille des particules inertes d'un facteur de 2.

La réaction (premier ordre en butane) est la suivante:



Le réacteur est alimenté d'air et de 1.8vol% de butane. Il fonctionne à 395°C. La pression à l'entrée est de 2.0 barg et la vitesse superficielle du gaz de 0.8 m/s (entrée).

- Enoncer quatre hypothèses pour simplifier la résolution de ce problème.
- Calculer la chute de pression le long du lit pour un réacteur actuel.

- Quand la conversion est de 90%, quelle est la constante cinétique en s^{-1} (Remarque : globale).
- Déterminer la chute de pression dans la nouvelle configuration du lit catalytique.
- Que proposerait de faire Haldor-Topsoe pour tirer parti de la réduction de la chute de pression avec le nouveau design?

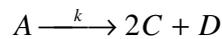
Données additionnelles :

μ	= 0.000033 Pa-s
ρ_p	= 1790 kg/m ³
ϕ	= 0.7 (sphéricité)
ϵ	= 0.45 (fraction de vide – ϕ en livre)
d_p	= 2.5 mm
D	= 25.4 mm
L	= 5 m

$$\frac{\Delta P}{L} = 150 \frac{\mu u_g}{(\phi d_p)^2} \frac{(1-\epsilon)^2}{\epsilon^e} + 1.75 \frac{\rho_g u_g^2}{\phi d_p} \frac{(1-\epsilon)}{\epsilon^3}$$

QUESTION 3 (5 pts)

La réaction suivante en phase gazeuse homogène est effectuée dans un réacteur en piston (PFR).



On alimente le réacteur à une température de 25°C et à une pression atmosphérique de 5 atm. Le taux d'alimentation est de 1520 lbmol/h de A et deux fois plus d'inertes. La réaction se fait de façon adiabatique et la température varie le long du réacteur.

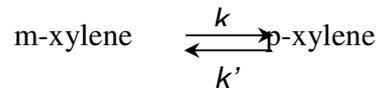
- Dériver les équations requises pour calculer le volume nécessaire pour atteindre une conversion spécifique.
- Enoncer trois hypothèses utilisées pour dériver l'équation.
- Proposer trois moyens de modérer l'élévation de la température, tout en maintenant la production.

ΔH_r (à 25°C)	= -3530 but/lb mol
C_{pA}	= 26.7 But/lbmol°F
C_{pC}	= 9.7 But/lbmol°F
C_{pD}	= 21.7 But/lbmol°F
C_{pI}	= 31.7 But/lbmol°F
k_1	= 10 h ⁻¹ @25°C
E_a	= -3500 cal/gmol

École Polytechnique de Montréal
Intra
5 octobre 2006
Calcul des réacteurs chimiques (GCH-3110)

Question 1 (7 pts - Réaction réversible et conversion à l'équilibre)

Considérez la réaction élémentaire d'isomérisation suivante :



Si X_E est la conversion à l'équilibre, exprimez le temps de réaction en fonction de X , X_E et k pour :

(a) Un réacteur en cuvette (batch) (2 pts)

Exprimez le « space time » (V/Q_0) en fonction de X , X_E et k pour :

(b) Un PFR (2 pts)

(c) Un CSTR (2 pts)

(d) Trouvez l'erreur dans la relation ci-dessous (s'il y en une) (1 pts)

$$\frac{V_{PFR}}{V_{CSTR}} = \frac{(X_E - X) \ln\left(\frac{X_E}{X_E - X}\right)}{X_E}$$

Question 2 (6 pts - Variation du taux de réaction avec la température)

Vous voulez obtenir la réaction en phase gazeuse $A \rightarrow B$ dans un PFR consistant de 50 000 tubes parallèles de 12 m de longueur avec un diamètre interne de 2 cm. Des expériences préliminaires vous ont permises d'obtenir la constante de réaction pour cette réaction élémentaire à deux températures :

$$k = 0.00152 \text{ s}^{-1} \text{ à } 90^\circ\text{C}$$

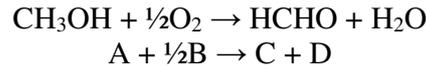
$$k = 0.074 \text{ s}^{-1} \text{ à } 150^\circ\text{C}$$

À quelle température (entre 90 et 150°C) le réacteur devrait-il être opéré afin d'atteindre une conversion de A de 80% ? Information additionnelle :

- Alimentation : A pure avec un débit massique de 4000 kg/min
- Pression dans le réacteur = 7 atm
- La perte de charge peut être négligée
- Masse molaire de A = 73 g/mol
- La réaction est isotherme

Question 3 (7 pts)

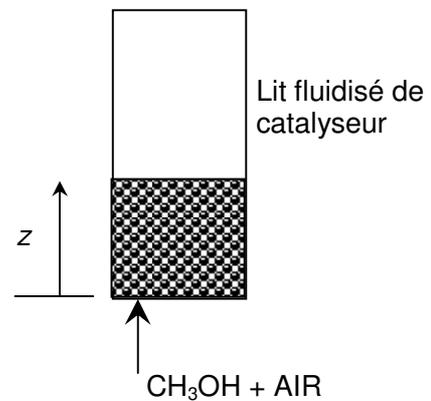
Vous désirez concevoir un nouveau procédé pour produire du formaldéhyde à partir de méthanol en utilisant un *lit fluidisé* (avec catalyseur). La capacité de l'usine est de 500 tonnes/jour d'une solution de 37% massique de formaldéhyde dans de l'eau (l'eau est rajoutée pour minimiser la décomposition du HCHO). La réaction en phase gazeuse suivante :



Vous devez proposer un procédé afin d'obtenir une conversion finale de 98%.

Information additionnelle :

- Le réacteur peut être représenté par un PFR.
- Vitesse du gaz dans le réacteur : $U_g = 0.7 \text{ m/s}$
- Température du réacteur : $T_0 = 320^\circ\text{C}$
- Pression à l'entrée : $P_0 = 5 \text{ atm (gage)}$
- $(-r_A) = \frac{k C_A C_B}{1 + K_A C_A + K_B C_B}$
- $k = 41 \text{ dm}^3/\text{mol/s}$
- $K_A = 2 \text{ dm}^3/\text{mol}$
- $K_B = 20 \text{ dm}^3/\text{mol}$
- Perte de charge : $\Delta P = \rho_b g z$
- $W = \rho_b X_a z$ donc : $\Delta P = g W / X_a$
- Densité bulk : $\rho_b = 600 \text{ kg/m}^3$
- Alimentation : 6% (molaire) de méthanol dans de l'air
- Composition de l'air : 21% O_2 et 79% N_2 (% molaire)
- La hauteur maximale du lit de catalyseur est de 10 mètres.



- (a) Quel est le diamètre du réacteur ? (1 pt)
 (b) Comment proposez-vous de simplifier l'expression du taux de réaction ? (1 pt)
 (c) Proposez 3 autres hypothèses afin de simplifier le problème. (2 pts)

En utilisant les hypothèses de (b) et (c) :

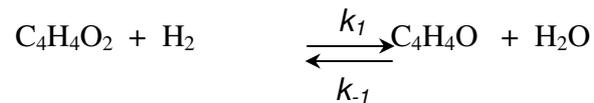
- (d) Quelle est la masse minimum de catalyseur requise ? (1 pt)
 (e) Quelle est la hauteur du lit de catalyseur (Z) ? (1 pt)

(5 pts - BONUS) Quelle est l'expression du taux de réaction en fonction de la conversion si vous opérez à une pression à l'entrée de 0.5 bar ?

École Polytechnique de Montréal
Quiz 1
3 octobre 2007
Calcul des réacteurs chimiques (GCH-3110)

Question 1 (6 pts - Conversion à l'équilibre)

Considérez la réaction élémentaire et réversible de l'hydrogénation de butanediol en THF qui se fait à haute pression dans l'eau (masse volumique totale de 1000 kg/m^3) avec l'acide sulfurique comme catalyseur :

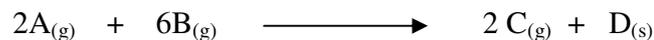


Si les concentrations en hydrogène et en butanediol sont respectivement de 0.1 kmol/m^3 and 2.0 kmol/m^3 (considérez que la concentration d'eau est égale à 53.5 kmol/m^3):

- (a) Est-ce qu'on peut négliger le changement de la concentration d'eau dans le calcul de la conversion à l'équilibre ? (justifiez votre réponse) (2 pt)
- (b) Avec une valeur de la constante d'équilibre, K , de 200, calculez la conversion à l'équilibre (2 pts)
- (b) Si vous augmentez la concentration d'hydrogène d'un facteur 4, quelle est la nouvelle conversion à l'équilibre ? (2 pts)

Question 2 (7 pts – Table Stoichiométrique)

Trouvez une expression pour la concentration de A en fonction de la conversion pour la réaction suivante (isobare, isotherme) dans un PFR: (*réaction de 1^{er} ordre par rapport à A*)

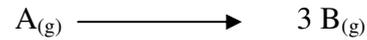


L'alimentation est équimolaire en A, B et un inerte.

- (a) Quelle est l'expression de C_A en fonction de X (montrez le calcul de ϵ) (1 pts)
- (b) Exprimer X en fonction des conditions opératoires pour un PFR (2 pts).
- (c) Exprimer X en fonction de conditions opératoires pour un CSTR (2 pts).
- (d) Quel réacteur est le meilleur ?

Question 3 (7 pts - Réaction irréversible)

Une réaction irréversible et élémentaire se passe dans un réacteur piston à température et pression constantes.



L'alimentation est équimolaire en A et en inerte. La conversion de A est de 80%.

- (a) Quelle est la conversion de A si vous réduisez le débit molaire de A de 50% ? (3 pts)
- (i) 0.76
 - (ii) 0.80
 - (iii) 0.84
 - (iv) 0.87
 - (v) 0.89
- (b) Quelle est la conversion si vous réduisez le débit molaire d'inerte de 50% ? (3 pts)
- (i) 0.76
 - (ii) 0.80
 - (iii) 0.84
 - (iv) 0.87
 - (v) 0.89
- (c) Vous produisez plus de B dans le cas (a) ou le cas (b) ? (1 pt)
- (d) Combien de B en plus ? (1 pt bonus)

École Polytechnique de Montréal
Intra 1
2 octobre 2008
Calcul des réacteurs chimiques – GCH-3110

Vous êtes nouvellement engagé par Arkema pour développer un procédé de fabrication de l'acide acrylique à partir du propylène. Sans vous laisser beaucoup de temps de réflexion, on vous demande de dire comment vous comptez procéder dans les prochains mois.

Question 1 (1 pt)

La première étape du procédé est l'oxydation partielle du propylène en acroléine. Vous comptez construire une usine avec un taux de production de 100 kt/a d'acroléine (333 j/a). Quelle doit être l'alimentation en propylène en kg/h, si la conversion est de 90 % ?



Question 2 (1 pt)

Quelle est la concentration d'oxygène (en kmol/m³) si la pression est de 3.5 barg et la température de 380°C ? Le pourcentage molaire du propylène à l'entrée est de 9.5 % avec 5% de H₂O (le reste étant de l'air).

Question 3 (1 pt)

Puisqu'il y a un risque de déflagration, il faut bien contrôler la concentration d'oxygène à la sortie du réacteur. Si la conversion de propylène diminue avec le temps, à quelle conversion de propylène la concentration d'oxygène à la sortie excède 10% ?

Question 4 (2 pts)

Juste avant que la réunion ne commence, vous êtes informé que Total (le fournisseur de propylène) n'accepte pas de livrer plus de 9 000 kg/h de propylène. En gardant la même proportion de gaz qu'à la Question 2, quel doit être le diamètre du réacteur si vous l'opérez avec une vitesse de gaz superficielle de 0.8 m/s ?

Question 5 (2 pts)

Si la réaction est du premier ordre et la constante cinétique égale à 0.0003 m³/kg cat·s⁻¹, quelle est la hauteur du lit en faisant l'hypothèse d'un écoulement piston et que la masse volumétrique en vrac du catalyseur est égale 800 kg/m³ ?

Question 6 (2 pts)

Dans le budget pour l'achat de catalyseur, vous avez seulement 2 500 k\$, puisque le catalyseur cout 50 \$/kg, vous avez 50 000 kg. Proposez deux manières d'augmenter la conversion (puisque vous avez moins de catalyseur qu'il faut pour les conditions d'opération prévu). (Bonus d'un point si vous pouvez proposer un troisième.)

Question 7 (3 pts)

L'ingénieur de procédé vous dit qu'ils ont déjà acheté un compresseur – avec une capacité de $7 \text{ m}^3/\text{s}$ – et un réacteur de 12 pieds de diamètre. L'hydrodynamique du réacteur n'est pas idéale (piston).

- (a) Calculez la conversion en faisant l'hypothèse d'un écoulement piston. (1 pt)
- (b) Calculez la conversion en faisant l'hypothèse de quatre CSTR en série. (2 pt)

Question 8 (4 pts)

Cet ingénieur revient avec de nouveaux calculs et vous dit que le compresseur pourrait opérer à $7 \text{ m}^3/\text{s}$ seulement si on recycle le gaz (qui n'a pas réagi). Donc, la composition de gaz a l'entrée va contenir 9.5% de propane et seulement 9.5% d'oxygène et la constante cinétique est égale à $0.3 \text{ m}^6/\text{kg}/\text{kmol}/\text{s}$. Vous vous rendez compte que vous devez considérer que c'est une réaction élémentaire ! Pour les conditions citées dans la Question 7 :

- (a) Calculez la conversion en faisant l'hypothèse d'un réacteur piston (2 pts)
- (b) Calculez la conversion en faisant l'hypothèse d'un réacteur CSTR (2 pts)

GCH-3110 — Calcul des réacteurs chimiques

Contrôle périodique #1

9 Juin 2009

Questions rapides (2.5)

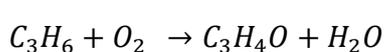
1. Est-ce que l'équation de design d'un réacteur piston dépend de la géométrie de celui-ci?
2. Est-ce possible d'atteindre une conversion de 100% dans un réacteur CSTR?
3. Est-ce que l'affirmation « le réacteur piston est toujours plus efficace qu'un réacteur CSTR » est vraie ?
4. Dans quel cas peut-on affirmer que l'on double la conversion lorsque l'on double la taille d'un réacteur CSTR (réacteur isotherme)
5. Est-ce que ce relation est toujours vraie « $C_A = C_{A0}(1-X)$ »?

Question 1 (4.5)

Vous êtes engagé comme consultant par une société afin d'augmenter la production d'un procédé chimique. Le procédé en question produit de l'acroléine (C_3H_4O) par oxydation partielle de propylène (C_3H_6) dans un réacteur parfaitement mélangé. Le réacteur est alimenté par un flux de propylène et d'air qui donne une fraction molaire à l'entrée de 2 mol% de C_3H_6 . Le débit volumétrique est de $5 \text{ m}^3/\text{s}$. De plus, la réaction se produit à une pression de 1 atm et à une température de 400°C .

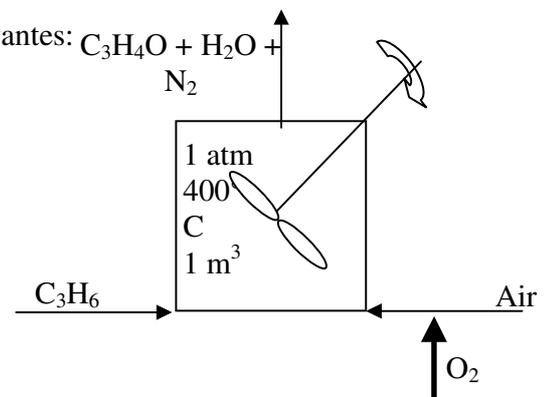
Comme solution, vous proposez d'ajouter de l'oxygène pure au flux d'air afin d'augmenter le taux de réaction. Calculer le débit molaire d'oxygène pure nécessaire afin d'augmenter la production d'acroléine de 50%.

La réaction et la cinétique sont décrites par les équations suivantes:



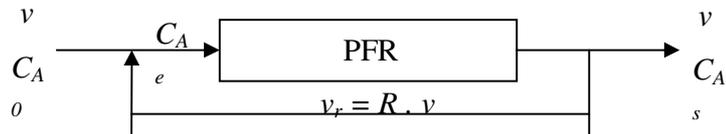
$$r = k'P_{O_2}^{1/2}$$

$$\text{Et } k' = 0.2 \frac{\text{mol}}{(\text{m}^3 \cdot \text{Pa}^{\frac{1}{2}} \cdot \text{s})}$$



Question 2 (4.5)

Dans plusieurs applications industrielles, la conversion simple passe est parfois faible. C'est pourquoi, on décide de recycler une fraction des produits de la sortie afin de permettre une augmentation de la conversion.



- a) Déterminez la conversion totale qui peut être atteinte dans un réacteur PFR de 3 m^3 avec une réaction irréversible et du premier ordre en phase gazeuse: $A \rightarrow B$ dans un réacteur à 500°C quand il n'y a pas de recycle ($R=0$)

- a) b) Refaite le calcul avec un taux de recyclage R :

$$R = \frac{v_r}{v} = 0.40$$

$$k = 0.10 \text{ s}^{-1}, P_0 = 5 \text{ atm et } v = 1 \text{ m}^3/\text{s}.$$

Question 3 (4)

Une réaction



dont la vitesse de réaction est du deuxième ordre ($-r_A = [0.005 \text{ litre}/(\text{mol})(\text{min})] C_A^2$) à lieu à température ambiante et en phase liquide dans un réacteur fermé. La concentration initiale de A est de 1 mol/L . Si le temps de remplissage et de vidage est de 18 min , quel est le temps de réaction qui maximalise la production journalière de R? En déduire la conversion optimale et le nombre batch par jour.

Question 4 (4.5)

Un réacteur industriel est utilisé afin de produire le composant B selon la réaction

$A \rightarrow B$. La réaction à lieu en phase liquide dans un bassin dépourvu d'un agitateur adéquat.

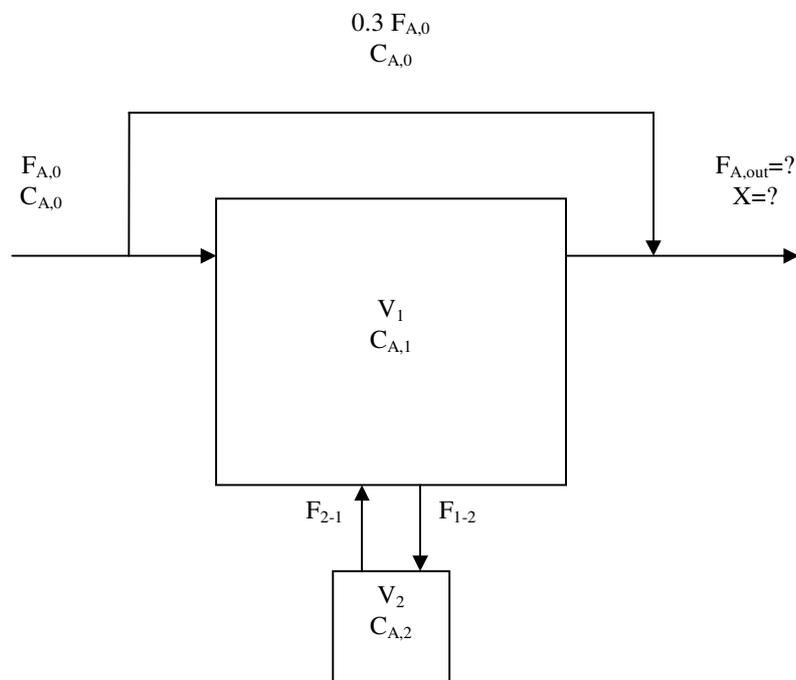
Une fraction des réactifs alimentés court-circuite le réacteur sans avoir même eu le temps de réagir. De plus, étant donné la mauvaise agitation, une deuxième zone de réaction est observée à la base de l'unité. Le schéma décrivant le comportement hydrodynamique du réacteur industriel suit :

Les volumes $V_1 = 0.8V_{tot}$ et $V_2 = 0.2V_{tot}$ sont parfaitement agités et les flux

$F_{1-2} = k_{tr} C_{A,1}$ et $F_{2-1} = k_{tr} C_{A,2}$. Les autres variables sont :

$$\begin{aligned} V_{tot} &= 20 \text{ m}^3 & -r_A &= kC_A \\ F_{A,0} &= 100 \text{ mol/min} & k &= 10^{-3} \text{ min}^{-1} \\ C_{A,0} &= 10000 \text{ mol/m}^3 & k_{tr} &= 2 \text{ m}^3/\text{min} \end{aligned}$$

- Trouvez la conversion globale de l'unité ainsi que le débit molaire sortant.
- Spécifiez également les concentrations intermédiaires $C_{A,1}$ et $C_{A,2}$



École Polytechnique de Montréal
Quiz 2
13 novembre 2007
Calcul des réacteurs chimiques (GCH-3110)

Question 1 (7 pts – Perte de charge – Chapitre 4.5)

Vous êtes responsable de l'amélioration de la productivité d'une usine qui fabrique l'acroléine à partir de propylène dans un lit fixe (réaction au premier ordre par rapport a propylène) :



Vous avez fait un appel d'offres pour des nouvelles technologies en spécifiant certains critères : pression à l'entrée de 3 bara, productivité de l'acroléine et une conversion maximale, etc. Vous avez reçu trois soumissions mais vous n'êtes pas sûr de la viabilité.

Fournisseur	Proposition
1	Changez les particules cylindriques pour les sphères d'un plus grand diamètre
2	Mettez un trou au centre des cylindres
3	Remplacez l'azote (inerte) pour le propane (inerte)

- (a) Calculez la perte de charge pour les fournisseurs 1 et 2. (3 points)
- (b) Calculez la conversion pour les fournisseurs 1 et 2. (3 points)
- (c) Qu'est-ce que vous allez proposer? (1 point)
- (d) Calculez l'avantage (ou désavantage) pour la proposition du fournisseur 3. (Bonus : 1 point)

Conditions :	Actuelles	Fournisseur		
		1	2	3
Diamètre, mm	25			
Longueur, m	3			
Pression à l'entrée, bara	3			
Température à l'entrée, °C	330			
U_g à l'entrée, m/s	1.5			
Masse moléculaire kg/kmol	30	30	30	42
ρ à l'entrée, kg/m ³	1.8	1.8	1.8	2.5
Diamètre de particule, mm	2	2.2	2	2
Mass volumique de particule, kg/m ³	2000			
Sphéricité	0.87	1	0.95	0.87
Fraction de vide	0.43	0.43	0.50	0.43
Viscosité, Pa-s	0.000031	0.000031	0.000031	0.000015
Constante de vitesse, m ³ kg ⁻¹ s ⁻¹	0.002			
Perte de charge, bar	1.59	?	?	?

Conversion

0.969

?

?

?

Question 2 (6 pts – Réactions multiples – Chapitre 6)

Les réactions parallèles suivantes se produisent dans un réacteur PFR de 12 m³ :



- 1- Calculez la sélectivité en E, le produit désiré. (2 points)
- 2- Calculez le débit massique de A restant dans le courant sortant si le débit volumétrique est de 4 m³/s, qu'on alimente les réactifs en proportion équimolaire et que le produit A est de l'acide acétique. On alimente 10 gmol/m³ de A. (2 points)
- 3- Si la concentration finale de A est de 0.07 gmol/m³ mais que celle de B est de 0,16mol/m³ parce qu'on l'a alimenté en excès, quelle est la sélectivité de E? (2 points)
- 4- Si la première réaction est comme suit, est-ce que un PFR donnera la même sélectivité qu'un CSTR avec la même concentration de B a la sortie? Pourquoi? (1 point de bonus)

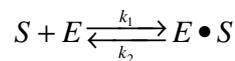
$$r_E = k_1 C_A C_B^{0.5}$$

$$r_F = k_2 C_A C_B$$

Question 3 (7 pts – Bioréacteur/Expérimentation – Chapitres 7/5)

Pour faire réagir une substance S afin d'obtenir un produit P, il faut utiliser conjointement une enzyme E et un élément actif R imprégné sur un catalyseur. Le milieu de réaction est liquide-solide étant donné que la substance active R est déposée à la surface de fines particules présentes en très grand nombre lors de la réaction.

Le mécanisme proposé pour cette réaction est le suivant :

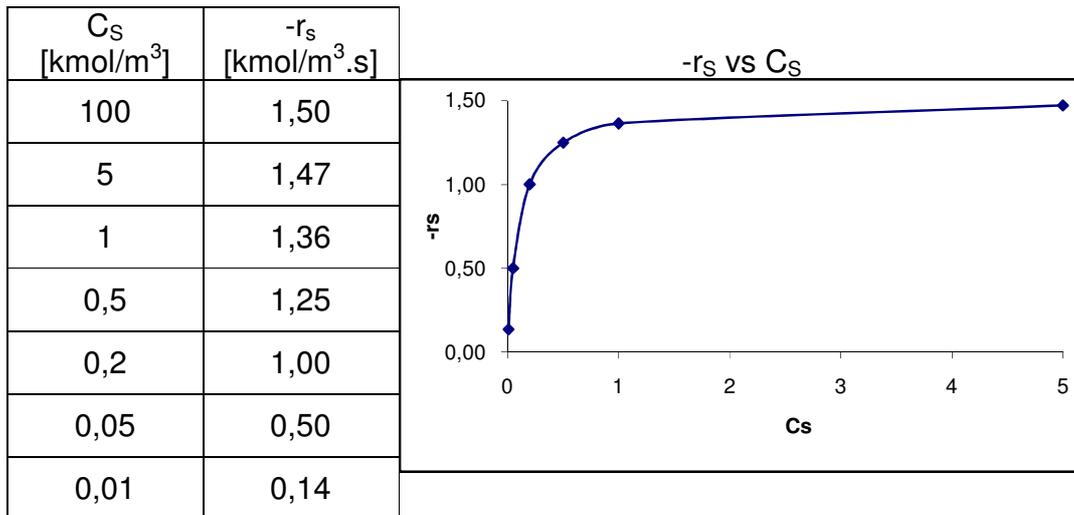


- (1) Décrivez l'expression du taux de réaction de substrat (-r_s) en fonction des constantes cinétiques et des concentrations connues. (2 points)
- (2) Posez des hypothèses afin d'obtenir la relation suivante (1 point):

$$-r_s = \frac{V_{\max} \cdot (S)}{(S) + K_M}$$

Expliquez les expressions de V_{max} et K_M

- (3) Les données expérimentales suivantes ont été obtenues pour cette réaction (2 points):



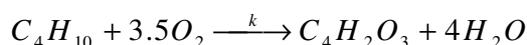
Sans tracer de graphique, obtenez les valeurs de V_{\max} et K_M

- (4) Calculez la conversion d'un réacteur CSTR de 10 m^3 si on alimente le substrat avec une concentration de 1 kmol/m^3 et un débit de 15 kmol/s . (2 points)

École Polytechnique de Montréal
Intra 2
12 novembre 2008
Calcul des réacteurs chimiques – GCH-3110

Question 1 (6 pts)

Haldor-Topsøe est une compagnie danoise dans les domaines de la catalyse et de l'ingénierie et elle a décidé de se lancer dans le marché d'anhydride maléique. Elle propose de construire un réacteur multi-tubulaire avec des particules de diamètre de 1.6 mm. La réaction (de premier ordre en butane) est la suivante:



Le réacteur est alimenté d'air et de 1.8 vol% de butane. Il fonctionne à 395°C. La pression à l'entrée est de 2.0 barg et la vitesse superficielle du gaz de 1.8 m/s (entrée).

- f. Calculer la chute de pression le long du lit. (2 pts)
- g. Donner quatre suggestions pour améliorer la productivité du réacteur. (2 pts)
- h. Quelles sont les contraintes pratiques de chacune de vos quatre suggestions ? (2 pts)

Données additionnelles :

μ	= 0.000033 Pa-s		
ρ_p	= 1790 kg/m ³	d_p	= 1.6 mm
ϕ	= 0.75 (sphéricité)	D	= 25.4 mm
ϵ_v	= 0.45 (fraction de vide – ϕ en livre)	L	= 5.0 m

Question 2 (8 pts)

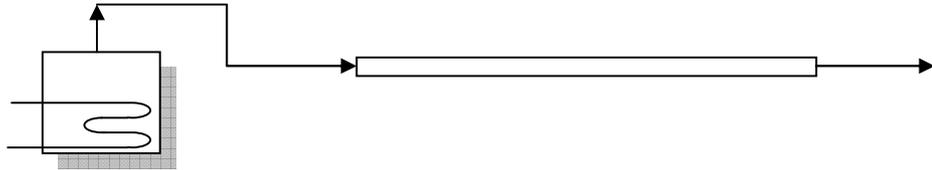
Vous avez fait une étude cinétique sur la décomposition d'acétaldéhyde à 518°C et 1.48 atm (absolue) dans un PFR. La réaction est la suivante :



Vous faites bouillir l'acétaldéhyde dans un réservoir et la vapeur entre dans un tube d'un diamètre interne de 3.3 cm et de 80 cm de long. Vous changez le débit massique d'acétaldéhyde en changeant la quantité de chaleur alimentée au réservoir. L'analyse des produits est donnée dans le tableau ci-dessous.

- (a) Quelle est la concentration de CH₃CHO à la sortie pour chaque expérience (1 pt)
- (b) Quel est le temps de contact pour chaque expérience (1 pt)
- (c) Quel est l'ordre de la réaction? (3 pts)
- (d) Quelle est la constante cinétique? (1 pt)
- (e) Quelle sera la production de méthane, en kg/h, dans un tube de 1 m de diamètre et de 10 m de long alimenté de 36 kg/h d'acétaldéhyde. (2 pts)

Débit massique, g/h	130	50	21
10.8			
Fraction d'acétaldéhyde décomposé	0.05	0.12	0.24
0.35			



Question 3 (6 pts)

Les réactions suivantes ont lieu dans un réacteur CSTR à une température de 50°C:



Toutes les réactions sont du premier ordre. Les constantes des cinétiques sont :

$$k_1 = 5.0 e^{\left(-\frac{E_{a1}}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{323}\right)\right)} h^{-1}; \quad E_{a1} = -15000 \frac{kJ}{kmol}$$

$$k_2 = 0.5 e^{\left(-\frac{E_{a2}}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{323}\right)\right)} h^{-1}; \quad E_{a2} = -25000 \frac{kJ}{kmol}$$

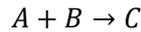
L'alimentation contient seulement A à une concentration de $C_{A0} = 7 \text{ gmol/l}$. Le temps de séjour est $\tau = 2.6 \text{ h (V/Q)}$.

- Calculez la concentration du produit B à la sortie du réacteur. (1 pt)
- Déterminez la sélectivité du produit B. (1 pt)
- Déterminez le rendement en B. (2 pt)
- Trouvez la valeur optimale de τ pour maximiser la production de B (à 50°C). (2 pts).
- Trouvez la température optimale pour maximiser la production de B à $\tau=2.6 \text{ h}$. (2 pts - bonus)

École Polytechnique de Montréal
Intra 2
21 juillet 2009
Calcul des réacteurs chimiques – GCH-3110

Question 1: (5 points)

La réaction élémentaire et irréversible suivante se produit en phase liquide :



La réaction est effectuée dans un réacteur parfaitement mélangé (CSTR) adiabatique avec une alimentation équimolaire de A et de B à une température de 300 K. Le débit volumétrique est de $2 \text{ dm}^3/\text{s}$ et $C_{A0} = 0.1 \text{ kmol}/\text{m}^3$.

- (a) Calculer le volume du CSTR requis pour obtenir une conversion de 85%.
- (b) Quelle est la température maximale de l'alimentation de sorte que la température d'ébullition du liquide (550 K) n'est pas excédée même pour une conversion de 100%?

Information additionnelle :

$$H_A^o(273) = -20 \text{ kcal/mol} \quad H_B^o(273) = -15 \text{ kcal/mol} \quad H_C^o(273) = -41 \text{ kcal/mol}$$

$$C_{PA} = C_{PB} = \frac{15 \text{ cal}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \quad C_{PC} = 30 \frac{\text{cal}}{\text{mol} \cdot \text{K}}$$

$$k = 0.01 \frac{\text{dm}^3}{\text{mol} \cdot \text{s}} \text{ at } 300 \text{ K} \quad E = \frac{10\,000 \text{ cal}}{\text{mol}} \quad R = 1.986 \frac{\text{cal}}{\text{mol} \cdot \text{K}}$$

$$k = k_1 \exp\left(\frac{-E}{RT}\right)$$

Question 2: (5 points)

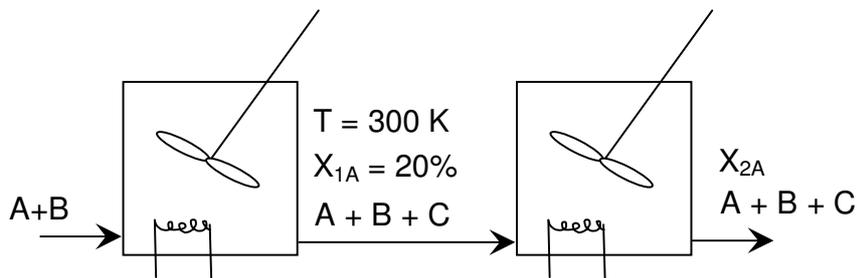
La réaction élémentaire en phase liquide $A + B \rightarrow C$ a lieu dans un CSTR de 1 m^3 . Le débit volumétrique total est de $0.5 \text{ m}^3/\text{min}$ et l'alimentation est équimolaire en A et B ($C_{A0} = C_{B0} = 1 \text{ mol/L}$).

Lorsque la réaction a lieu dans un réacteur adiabatique, la température à la sortie du CSTR est de 350 K et la conversion est de 40%.

Dans ce problème, nous nous intéressons à l'étude d'un ou de deux réacteurs isothermes. Ainsi, lorsqu'on utilise un seul réacteur isotherme (température = 300 K) la conversion est de 20%.

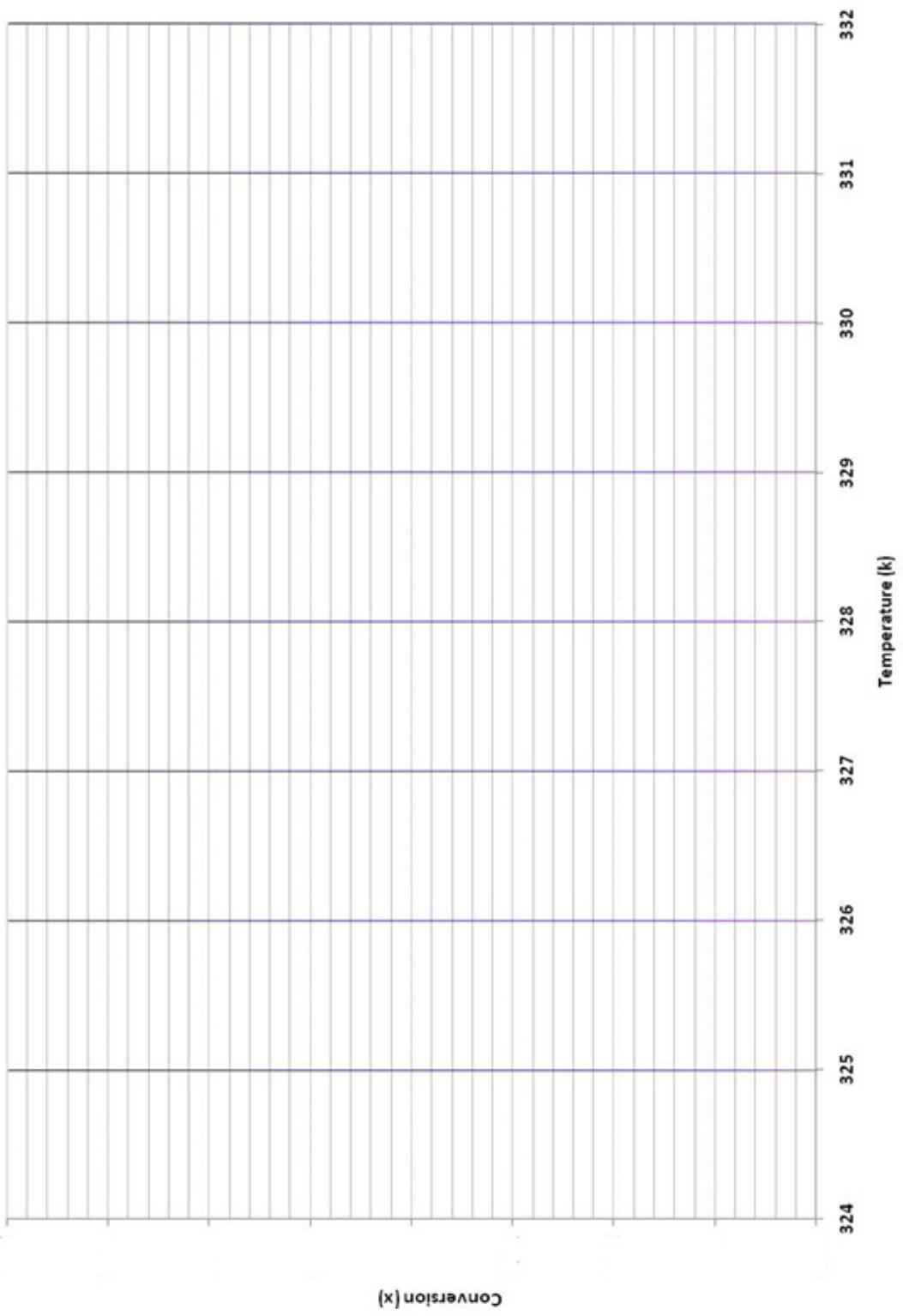
Il est proposé d'ajouter un deuxième CSTR de 1 m^3 en aval (en série) du premier CSTR. Ce deuxième CSTR est équipé d'un échangeur de chaleur avec $UA = 4 \frac{\text{kJ}}{\text{min.K}}$ et la température du fluide réfrigérant est de 350 K.

- Quel est le taux d'extraction de chaleur nécessaire afin d'obtenir une opération isotherme dans le 1^{er} CSTR (en kW)?
- Quel est la conversion obtenue à la sortie du 2^{ième} CSTR? (Veuillez trouver la conversion à l'aide du graphique de la page suivante)



Information additionnelle :

$$C_{PA} = 25 \frac{\text{kJ}}{\text{mol.k}} \quad C_{PB} = 35 \frac{\text{kJ}}{\text{mol.k}} \quad C_{PC} = 60 \frac{\text{kJ}}{\text{mol.k}}$$



Question 3: (5 points)

La réaction exothermique suivante à lieu dans un réacteur CSTR en présence d'un catalyseur solide selon la stœchiométrie $A \rightarrow B$

L'alimentation au réacteur se fait à raison de 10 mol/min à 35°C . La concentration de A dans l'alimentation est de 2 mol/L . Un fluide de refroidissement à 20°C sert au contrôle de la température.

Suite à la mise en marche du réacteur, une anomalie survient. L'entreprise qui a développé le réacteur fait appel à vos services afin de rectifier la situation. À partir des données suivantes, suggérez une explication à la variation de la conversion et de la température en fonction du temps. Quantifiez lorsque cela est possible. Illustrez votre explication.

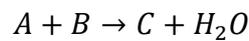
Temps (h)	0	5	10	15	20	25	30	35	40	45
T ($^\circ\text{C}$)	80	79	78	77	60	50	50	49	49	48
X	0.90	0.88	0.86	0.85	0.55	0.43	0.42	0.41	0.40	0.40

Question 4: (5 points)

Vous êtes engagé pour définir une procédure de démarrage pour un réacteur parfaitement mélangé (CSTR) qui est utilisé pour un procédé de neutralisation d'un acide. Pour démarrer le procédé, vous recommandez que les opérateurs suivent les étapes suivantes :

- (1) Remplir le CSTR avec les réactifs
- (2) Couper l'alimentation de réactifs et laisser les réactifs réagir en utilisant le CSTR comme un réacteur en cuvée (batch) jusqu'à ce que les concentrations soient égales aux valeurs qui seraient obtenues si le CSTR était opéré en régime permanent
- (3) Démarrer l'alimentation de réactifs et débiter l'opération du CSTR en régime permanent (les concentrations des réactifs et produits sont alors constantes)

L'alimentation de l'acide A et de la B sont de 2 kmol/m^3 à l'entrée du réacteur. La réaction est la suivante:



La conversion désirée est 90% avec un débit massique total de 0.6 kg/s . La réaction est irréversible et le taux de réaction de premier ordre :

$$r_A = k C_A^{0.5} C_B^{0.5}$$

Le réacteur est adiabatique et les capacités thermiques (C_p) sont constantes et sont incluses dans le tableau ci-dessous.

Composé	C_p (kJ/kmol.k)	Mass molaire (kg/kmol)
A	96	98
B	110	74
C	130	
H ₂ O	75	

- (a) Quelle est la température du réacteur en régime permanent?
- (b) Quel est le volume du réacteur requis?
- (c) Combien de temps, après le remplissage initial du réacteur (lors du démarrage), l'opérateur devrait attendre avant d'ouvrir l'alimentation et d'utiliser le réacteur comme un CSTR?

Information additionnelle:

La température de l'alimentation est de $25 \text{ }^\circ\text{C}$

$$k = 1.5 \times 10^{18} \exp(-15000/T)$$

$$\Delta H_{Rx}^o = -105\,000 \text{ kJ/kmol à } 298 \text{ K}$$

Bonne Chance !

Prof. Jamal Chaouki

Jean-Philippe Laviolette

Mania Abdollahi Neisiani

École Polytechnique de Montréal
Examen Final,
19 décembre 2005
Calcul des réacteurs chimiques

Question 1 (10 pts – Réactions à l'équilibre)

Considérez une réaction homogène irréversible en phase gazeuse qui se passe à une pression (8.5 atm) et température constante 450°F).

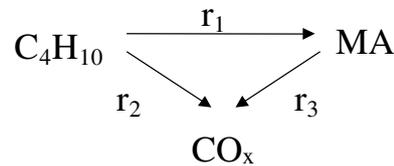


Les réactions sont de premier ordre. La concentration d'équilibre (K_c) est 0.822 et la constante cinétique (k_A) est 20.2 min^{-1} . Le débit total alimenté au réacteur piston est de 860.5 lb-mol/h avec 40 mol% A et 60 mol% inertes. S'il faut opérer à une conversion à 90% :

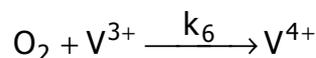
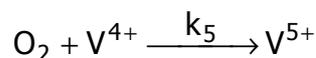
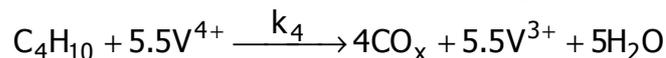
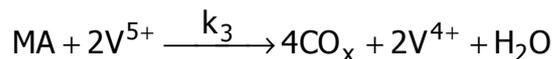
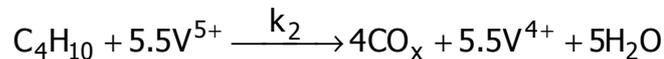
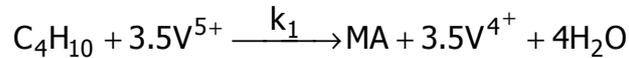
- (a) calculer le volume du réacteur
- (b) calculer le GHSV.

Question 2 (10 pts PSSH)

Le butane réagit avec le catalyseur vanadium pyrophosphate pour former de l'anhydride maléique (MA – $C_4H_2O_3$) et de l'eau. En plus de cette réaction, le butane peut réagir avec des sites oxydés pour former des quantités égales de CO et de CO_2 (CO_x). MA peut réagir sur ces sites pour former du CO_x tel que décrit ci-dessous :

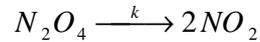


La réaction suit un mécanisme de type Mars van-Krevelen, dans lequel le butane réagit avec l'oxygène absorbé par la surface du catalyseur pour former du MA, créant alors des sites vacants. En se basant sur les réactions élémentaires ci-dessous, développer des expressions décrivant les concentrations de θ^{5+} , θ^{4+} et de θ^{3+} (respectivement fractions de sites actifs oxydés et fractions de sites actifs vacants) en fonction de la composition en gaz et de la constante cinétique. Notez que les réactions sont premier ordre en butane est les sites actives.



QUESTION 3 (10 pts – Analyse des données)

Le dimère $N_2O_{4,g}$ se dissocie en $NO_{2,g}$, selon la réaction suivante :



Les données sont mesurées dans un réacteur en cuvette, parfaitement agité, où la pression est constante. On suppose que cette dissociation en phase gazeuse est irréversible. Le taux de réaction est mesuré en laboratoire à une température de 40°C et à une pression de 3.0 atm. Initialement, le réacteur est chargé de 85% de N_2O_4 et de 15% d'inertes. En se basant sur l'expression suivante:

$$(-r_A) = kC_A^n$$

- Calculer le constant k, et l'ordre n.
- Quel est le volume d'un réacteur continu parfaitement mélangé (CSTR) qui atteint une conversion de 90% et qui produit 2000 gmol/min de NO_2 pour une alimentation contenant 50% d'inertes et 50% de N_2O_4 ?

Temps	Volume
s	cm^3
0	200
30	251
60	276
120	302
240	322

QUESTION 4 (10 pts – Réactions multiples)

Soit les réactions suivantes en phase liquide:



qui se déroulent dans un CSTR parfaitement isolé. La réaction désirable est du premier ordre en A et en B, alors que la réaction indésirable est d'ordre 0 en A et du deuxième ordre en B. Le taux d'alimentation est équimolaire en A et B. L'espèce A est alimentée à 100°C et l'espèce B entre à 50°C . La température d'opération du réacteur est 400 K. Le débit d'alimentation de A est $F_{A0} = 60 \text{ mol/min}$ et $C_{pA} = 20 \text{ cal/mol}$, $C_{pB} = 20 \text{ cal/mol}$, $C_{pD} = 50 \text{ cal/mol}$, $C_{pU} = 40 \text{ cal/mol}$.

$$\Delta H_{R1} = -3000 \text{ cal/mol de A à } 300 \text{ K}$$

$$\Delta H_{R2} = -5000 \text{ cal/mol de A à } 300 \text{ K}$$

$$k_1 = 1000 \exp(-2000/T) \quad \text{min}^{-1}$$

$$k_2 = 1000 \exp(-3000/T) \quad \text{min}^{-1}$$

$$C_{A0} = 0.01 \text{ mol/dm}^3 = C_{B0}$$

- Quels seront les débits molaires des produits D et U à la sortie du réacteur?
- Quel est le volume du CSTR requis pour les conditions d'opération données?
- Existe-t-il une méthode d'optimiser la production de D?

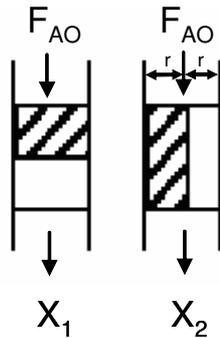
**ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL
DÉPARTEMENT DE GÉNIE CHIMIQUE**

**GCH 3110 – CALCULS DES RÉACTEURS CHIMIQUE
AUTOMNE 2006**

EXAMEN FINAL

Question 1 (8 pts)

Les réacteurs pistons expérimentaux sont souvent dilués avec des particules inertes telles que le quartz, le SiC ou l' α -alumine afin d'améliorer l'iso-thermicité du lit et réduire au minimum d'autres effets potentiellement inquiétants sur l'interprétation des données, tels que la dispersion et le renardage (by-passing). La dilution, cependant, peut négativement influencer la conversion du réactif. L'ampleur de cette déviation dépend de la quantité de dilution, de la cinétique de réaction, de la particule, de la géométrie du réacteur, et du degré de ségrégation du catalyseur et du diluant. L'influence de la distribution du catalyseur est illustrée en calculant la conversion (X) en fonction du space time (τ) pour deux distributions hypothétiques de catalyseur comme représenté sur la figure suivante.



Pour une réaction de première ordre élémentaire et irréversible ($A \rightarrow B$) et en supposant un écoulement piston,

- quelle est la conversion maximale pour chaque cas (X_1, X_2) (3 points)
- A basse conversion (petites valeurs de $k\tau$), la conversion des deux configurations est égale. A quelle valeur de $k\tau$, l'écart de conversion entre les deux configurations dépasse 5% absolu (35% versus 40.1%, par exemple)? (5 points)

Question 2 (8 pts PSSH)

L'oxydation humide de l'air (Wet Air Oxidation - WAO) présente un intérêt de plus en plus important grâce à ses performances accrues par rapport aux processus biologiques traditionnels de rejets industriels fortement toxiques et non biodégradables dans les eaux usées. La technologie de WAO se rapporte au processus où des polluants organiques sont oxydés en utilisant l'oxygène comme oxydant dans la phase liquide. Typiquement un processus de WAO se fait à une température entre 398-593 K.

Vous êtes en train d'étudier la cinétique hétérogène de l'oxydation humide catalytique d'air (CWAO) du phénol en utilisant le cuivre sur le charbon actif comme catalyseur. Afin d'empêcher la désactivation du catalyseur provoquée par la lixiviation du cuivre, une solution tampon a été ajoutée dans le système et la concentration initiale en phénol a été réduite. Après plusieurs mois

d'études, vous avez proposé un modèle mathématique basé sur le mécanisme de Langmuir-Hinshelwood pour simuler la cinétique.

Adsorption du phénol (où θ est un centre actif)



Adsorption dissociative de l'oxygène



Réaction



- Citez trois moyens que vous connaissez pour vous assurer de mesurer la cinétique de réaction intrinsèque (2 points)
- Dérivez l'expression du taux de consommation de phénol si la réaction à la surface du catalyseur est l'étape limitante. (4 points)
- Dans un réacteur commercial, comment allez-vous faire pour accélérer le taux de réaction (3 façons)? (2 points)

Question 3 (8 pts – Analyse des données)

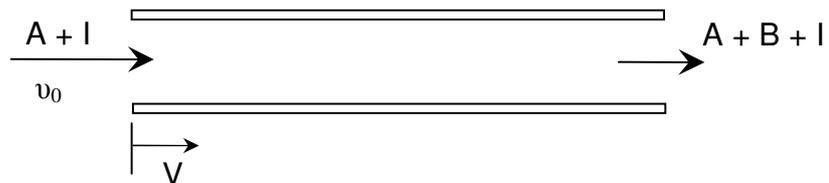
La réaction suivante : $A + B \rightarrow C$ a lieu dans un réacteur batch à volume constant en phase liquide. Pour étudier la cinétique de réaction ($-r_A = kC_A^\alpha C_B^\beta$), on réalise différentes expériences dont les résultats sont présentés dans le tableau suivant.

Essai	r_C (mol/l.min)	C_A (mol/l)	C_B (mol/l)	T (K)
1	3.73	1	1	350
2	14.92	2	1	350
3	33.97	3	1	350
4	12.73	3	2	300
5	15.59	3	3	300
6	18	3	4	300

- Déterminez l'ordre de réaction par rapport à A. (2 points)
- Déterminez l'ordre de réaction par rapport à B. (2 points)
- Évaluez la constante cinétique de la réaction ($k = k_0 \exp\{-Ea/R(1/T-1/300)\}$). (4 points)

Question 4 (8 pts – Transfert de chaleur)

Vous opérez un réacteur piston (PFR) adiabatique en y alimentant un mélange composé de 30 mol% de A et de 70 mol% d'inerte. Dans le PFR, la réaction élémentaire et exothermique suivante se produit :



- (a) Si la température à l'entrée et à la sortie du réacteur est de 200°C et 400°C respectivement, quelle est la conversion finale ? (4 points)
- (b) Écrivez l'équation différentielle vous permettant de trouver le volume. (4 points)

Informations additionnelles:

- $k = 50 \text{ s}^{-1}$
- $v_0 = 1 \text{ L/s}$
- $\Delta C_p = 0$ (Le C_p du mélange demeure constant)
- Inerte : $C_p = 30 \text{ J/mol K}$
- Espèce A : $C_p = 5 \text{ J/mol K}$
- Perte de charge négligeable

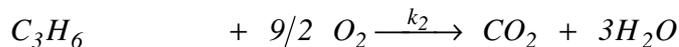
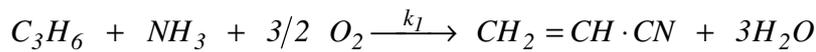
Question 5 (8 pts – Transfert de masse)

Vous êtes l'ingénieur responsable pour concevoir un lit fluidisé pour fabriquer de l'acrylonitrile à partir de propylène, d'ammoniac et d'air. La production totale prévue est de 50 000 tonnes/an. L'objectif est d'atteindre 90% conversion avec un rendement de 80%. Un des principaux avantages des lits fluidisés par rapport aux lits fixes, est que les gradients de température sur la longueur et radialement sont négligeables. Vous décidez, donc, de maximiser la température et d'opérer à 450°C et 2.5 bar dans le lit.

- Quel est la hauteur du lit (faite l'hypothèse que le lit est isobare)? (4 points)
- Quel est le diamètre du lit ? (2 points)
- Comment la conversion changera-t-elle si vous tenez compte du changement de pression avec la hauteur? (2 points)

Information additionnelle:

- $k_1 = 1.4 \text{ s}^{-1}$
- $k_2 = 0.35 \text{ s}^{-1}$
- $\text{C}_3\text{H}_6 : \text{NH}_3 : \text{Air} = 1 : 1.1 : 11$
- $\epsilon_{mf} = 0.39$
- $U_g = 0.3 \text{ m/s}$



Des relations importantes pour modéliser l'hydrodynamique du réacteur sont :

$$\bar{\epsilon} = \frac{U_g + 1}{U_g + 2}; \quad U_b = \frac{U_g}{\delta}; \quad \delta = \frac{\bar{\epsilon} - \epsilon_{mf}}{1 - \epsilon_{mf}}; \quad U_b = 0.71\sqrt{gd_b}; \quad K_{be} = \frac{0.02}{(d_b)^{4/3}}$$

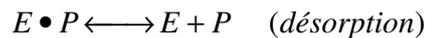
**ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL
DÉPARTEMENT DE GÉNIE CHIMIQUE**

**GCH 3110 – CALCULS DES RÉACTEURS CHIMIQUES
AUTOMNE 2007**

EXAMEN FINAL

Question 1 (10 points – Catalyse)

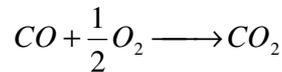
On vous a proposé un mécanisme pour une réaction s'effectuant à la surface d'une enzyme. Vous ne savez pas quelle est la réaction limitante. Voici le mécanisme proposé :



- (a) Pour les 3 cas envisageables, décrire l'expression de la vitesse de la réaction limitante choisie. (6 points)
- (b) Laquelle de ces 3 réactions ne peut pas être représentée par une cinétique de type Michaelis-Menten ($-r_s = \frac{V_{\max} C_s}{C_s + K_M}$) – justifier votre réponse? (2 points)
- (c) Quelle hypothèse doit être posée pour obtenir l'expression ci-dessus ? (1 point)
- (d) Donner l'expression de V_{\max} et K_M en fonction des paramètres connus. (1 point)

Question 2 (10 points – un Transfert de chaleur)

Vous êtes responsable de la section environnement d'une usine de production de plastique. Vous venez d'acquérir un nouveau lit fixe permettant de traiter les rejets des effluents de l'usine. L'objectif de ce lit est de transformer le CO contenu dans l'air en CO₂ afin de limiter l'impact sur l'environnement extérieur (X=100 %). La température du flux entrant dans ce lit est de 200 °C et le débit total d'air est de 31 300 kg/h.



$$\Delta H_{f,298}^{\circ}(CO_2) = -94\,100 \frac{\text{kcal}}{\text{kmol}}$$

$$\Delta H_{f,298}^{\circ}(CO) = -26\,400 \frac{\text{kcal}}{\text{kmol}}$$

Espèces	T, K	Cp (kJ/kmol/K)		
	298	473	673	
CO	29	30	31	
CO ₂	37	44	49	

H ₂ O	34	35	37
N ₂	30	31	33
O ₂	29	32	31

- Calculer la fraction molaire de CO maximal dans l'air si la température maximale à la sortie du lit est de 400 °C ? (4 points)
- Énoncer deux simplifications pour trouver la solution. (2 points)
- Si l'on divise le débit d'air et CO par un facteur 2, quelle sera la nouvelle température obtenue pour la concentration maximale trouvée en (a)? (2 points)
- Malheureusement, dans certaines conditions dans l'usine, la concentration en CO dans l'air dépasse la valeur maximale que vous avez déterminée en a). Quelles solutions proposeriez-vous afin que la température à la sortie du lit ne dépasse pas 400 °C? (2 points)

Question 3 (10 points – Transfert de masse interne)

Vous travaillez avec un catalyseur formé de particules sphériques ayant une certaine tortuosité et une surface spécifique élevée. Vous disposez pour l'instant de deux types de particules ayant des diamètres de 1 cm et 0.2 cm.

La réaction se déroulant sur ces particules est de premier ordre :

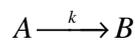


Schéma de la particule montrant les pores

- Calculer le module de Thiele pour chacune des particules. (2 points)
- Trouver le facteur d'efficacité pour les deux cas. (2 points)
- À partir de l'équation $\frac{d^2 C_A}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dC_A}{dr} - \frac{k \rho_p}{D_E} C_A = 0$, et en posant les conditions limites, donner la concentration à $r/R = 0.95$ en fonction de la concentration à la surface pour la petite particule et la grosse particule. (2 points)
- Est-ce que vous préférez que le taux de réaction soit contrôlé par le transfert de masse ou la cinétique? Quelle particule serait la meilleure et pourquoi? (2 points)
- Pour une PFR 3 m de long, calculer la conversion pour chaque type de particule. (2 points)

Données

$k = 0.0047 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$, $D_E = 0.005 \text{ cm}^2/\text{s}$, $\rho_p = 1700 \text{ kg/m}^3$, $\varepsilon_v = 0.41$,
 $D = 0.025 \text{ m}$, $U_g = 2 \text{ m/s}$

Question 4 (10 points – Transfert de masse externe/lits fluidisés)

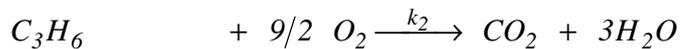
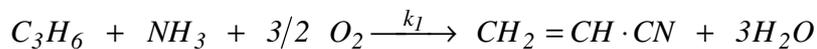
Vous êtes l'ingénieur responsable de la conception d'un lit fluidisé pour fabriquer de l'acrylonitrile à partir de propylène, d'ammoniac et d'air. La production totale prévue est de 50 000 tonnes/an. L'objectif est d'atteindre 90 % conversion. Un des principaux avantages des lits fluidisés par rapport aux lits fixes, est que les gradients de température sont négligeables. Vous décidez, donc, de maximiser la température et d'opérer à 450 °C et 2.5 bar dans le lit.

- (d) Quelle est la sélectivité et quel est le rendement (sans tenir compte de la limitation de transfert de masse) (1 point)?
- (e) Quel est le diamètre du lit ? (2 points)
- (f) Quelle est la hauteur du lit (faire l'hypothèse que le lit est isobare)? (4 points)
- (g) Calculer la conversion en tenant compte du changement de pression avec la hauteur? (3 points)

Information additionnelle :

- k_1	= 1.4 s ⁻¹
- k_2	= 0.35 s ⁻¹
- $k_m a_m$	= 8 s ⁻¹
- $C_3H_6 : NH_3 : Air$	= 1 : 1.1 : 15
- ϵ_v	= 0.6
- U_g	= 0.6 m/s
- ρ_p	= 1400 kg/m ³

Faire l'hypothèse que la réaction est de premier ordre en propylène. (Donc, l'ammoniac et l'oxygène sont en surplus.)



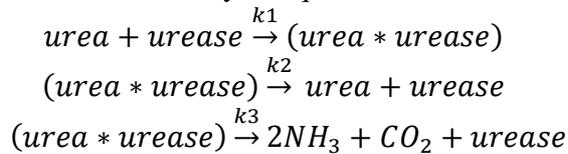
**ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL
DÉPARTEMENT DE GÉNIE CHIMIQUE**

**GCH 3110 – CALCUL DES RÉACTEURS CHIMIQUES
AUTOMNE 2008**

EXAMEN FINAL

Question 1 (10 points – Catalyse)

Vous êtes en présence de la réaction enzymatique suivante :



- (a) Décrivez le taux de consommation du substrat. (3 pts)
 (b) Quelles simplifications devez-vous faire pour obtenir l'expression suivante? (2 pts)

$$-r_s = \frac{V_{\max}(s)}{k_M + (s)}$$

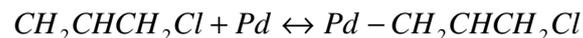
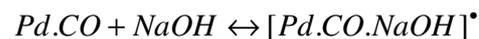
- (c) Quelles sont les valeurs des paramètres V_{\max} et k_M ? (2 pts)

$-r_s$	$\frac{1}{s} \left(\frac{m^3}{kmole} \right)$
1.08	5.0
0.55	50.0
0.38	100.0
0.2	200.0
0.09	500.0

- (d) Quel est le temps requis pour atteindre une conversion de 80% s'il y a 20 kmol d'urée initialement dans une cuve batch de 5 m³? (3 pts)

Question 2 (10 points – Catalyse)

On effectue la carbonation du chlorure d'allyle (AC) sur un catalyseur de palladium (Pd) dans la phase liquide d'un réacteur complètement mélangé. Le mécanisme de réaction proposé est le suivant (réactions à l'équilibre) :



- (a) Si l'on considère que la dernière réaction est limitante, quelle est l'expression de taux de réaction? (5 pts)
 (b) Donnez trois façons d'augmenter le taux de réaction. Justifiez vos réponses. (3 pts)

- (c) Si l'on diminue la taille de catalyseur et si la productivité augmente, est-ce que la réaction est lente ou rapide par rapport au transfert de masse interne? (1 pt)
 (d) Comment pouvez-vous vérifier si le transfert de masse externe est limitant? (1 pt)

Question 3 (10 points – Transfert de chaleur)

- (a) Calculez $\Delta H_{rxn,298}^{\circ}$ de la combustion du méthane. (1 pt)
 (b) Quel est le pourcentage de méthane pour avoir une combustion stœchiométrique dans l'air? Quel est le pourcentage d'éthane (en air)? (2 pts)
 (c) Calculez la température adiabatique de la combustion complète de 10 vol% de méthane dans l'air (température des réactants = 25°C). (2 pts).
 (d) Lequel des deux mélanges a une plus grande température adiabatique? (5 pts)
 (Répondez avec les symboles suivants : >, < ou =)

1. Méthane/air stœchiométrique _____ Éthane/air stœchiométrique
2. 10% CH₄ + 90% air _____ 10% CH₄ + 90% O₂
3. 5% CH₄ + 90% O₂ _____ 10% CH₄ + air
4. 5% CH₄ + 90% air _____ 10% CH₄ + O₂
5. 20% CH₄ + 80% air _____ 8% CH₄ + 92% air

$$\Delta H_{f,298}^{\circ}(\text{CH}_4) = -17\,900 \frac{\text{kcal}}{\text{kmol}} \quad \Delta H_{f,298}^{\circ}(\text{C}_2\text{H}_6) = -20\,200 \frac{\text{kcal}}{\text{kmol}}$$

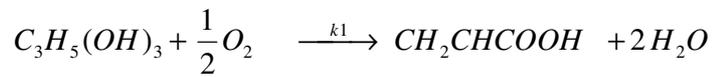
$$\Delta H_{f,298}^{\circ}(\text{H}_2\text{O}) = -57\,800 \frac{\text{kcal}}{\text{kmol}} \quad \Delta H_{f,298}^{\circ}(\text{CO}_2) = -94\,100 \frac{\text{kcal}}{\text{kmol}}$$

Espèces	Cp* (kJ/kmol/K)			
	T, K	298	1298	2298
CH ₄		36	82	
C ₂ H ₆		53		
CO ₂		37	57	61
H ₂ O		34	45	53
N ₂		29	34	36
O ₂		29	36	39

*http://www.engineeringtoolbox.com/nitrogen-d_977.html

Question 4 (10 points – Transfert de masse externe/lits fluidisés)

Vous avez inventé un nouveau procédé pour fabriquer de l'acide acrylique à partir du glycérol :



La réaction est irréversible et de premier ordre en glycérol. La réaction se fait à 300°C, à 4.8 bara et à une fraction molaire de glycérol de 0.05.

- Vous avez développé le procédé dans un petit réacteur. En alimentant 92 g/h de glycérol vous avez obtenu une conversion de 70%. Quand vous avez doublé le débit du glycérol et de l'air, la conversion a baissé jusqu'à 45%. Est-ce que votre réacteur expérimental est piston ou parfaitement mélangé? (1 pt)
- Quelle est la constante cinétique (k_1) s'il y a 200 g de catalyseur? (1 pt)
- Si la masse volumique en vrac (ρ_b – bulk density) de catalyseur est de 1800 kg/m³, exprimer la constante cinétique en s⁻¹. (1 pt)
- Quel est le diamètre nécessaire d'un réacteur à lit fluidisé pour produire 80 kt/a d'acide acrylique si le lit fluidisé opère à 0.7 m/s (conditions à l'entrée, sélectivité 100%, conversion de 90% et les mêmes T, P et concentrations). (1 pt)
- Quel est la hauteur du lit? (2 pts)
- Vous avez mis 4.1 m de catalyseur dans le réacteur pour atteindre une conversion de 95%. Finalement, après avoir construit le réacteur, la conversion n'est que de 80%. Énoncez quatre hypothèses qui expliquent la différence. (2 pts)
- Si la raison est due uniquement à une limitation de transfert de masse, calculez k_{mam} . (2 pts)