

## Capacité numérique : Etude de la stabilité des points de fonctionnement d'un réacteur

### Objectif

Déterminer, à l'aide d'un langage de programmation, les points de fonctionnement d'un réacteur ouvert (RCPA d'ordre 1) et étudier leur stabilité. **Durée = 1h.**

### I. Exemple étudié et données numériques

Nous nous plaçons dans le cadre du réacteur continu parfaitement agité (RCPA) en marche adiabatique. Dans ce régime de fonctionnement, la **température du milieu réactionnel  $T = T_s$ , devient une variable interne du système** libre d'évoluer.

On étudie la réaction de décomposition thermique du peroxyde de ditertioobutyle ( ${}^t\text{BuO}$ )<sub>2</sub> menée dans un réacteur RCPA de volume  $V = 500 \text{ mL}$ , alimenté en réactif liquide pur. La cinétique est d'ordre par rapport à ( ${}^t\text{BuO}$ )<sub>2</sub> avec le facteur préexponentiel  $A = 10^{15} \text{ s}^{-1}$  et l'énergie d'activation  $E_a = 157 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ .

On a :

- Température d'entrée :  $T_e = 200^\circ\text{C}$
- Enthalpie standard de la réaction d'hydrolyse :  $\Delta_r H^\circ = -150 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ .
- Masse molaire de ( ${}^t\text{BuO}$ )<sub>2</sub> :  $M = 146 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$ .
- Masse volumique de ( ${}^t\text{BuO}$ )<sub>2</sub> :  $\rho = 900 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$ .
- Capacité thermique massique de ( ${}^t\text{BuO}$ )<sub>2</sub> :  $c_p^\circ = 2,1 \text{ J}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ .
- Débit du liquide assimilé à du peroxyde de ditertioobutyle pur :  $D_v = 3 \text{ L}\cdot\text{h}^{-1}$ .
- Le liquide entre dans le réacteur à  $T_e = 20^\circ\text{C}$ .
- La paroi externe du réacteur a une surface  $S = 30 \text{ cm}^2$  et est maintenue à  $T_0 = 20^\circ\text{C}$  par un système de refroidissement. Le coefficient d'échange thermique conducto-convectif à travers la paroi vaut  $h = 80 \text{ W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$ .

On considère ci-après un programme Python permettant de déterminer les points de fonctionnement du réacteur.

## II. Etude théorique

**Q1.** Exprimer le taux de conversion  $X$  pour un RCPA d'ordre 1, en fonction de  $k$ , la constante cinétique et de  $\tau$ , le temps de passage.

**Q2.** En utilisant la loi d'Arrhénius, en déduire l'expression de  $X$  en fonction de  $A$ ,  $E_a$  et  $\tau$ . On obtient ainsi l'équation cinétique  $X_{cin}(T)$ .

Un bilan d'énergie permet d'établir la relation ci-dessous, reliant le taux de conversion  $X$  à la température en sortie (équation thermochimique) :  $X_{th} = -hSM(T-T_0)/(D_v\Delta rH^\circ\rho) - c_p^\circ M(T-T_e)/\Delta rH^\circ$ .

**Q3.** Dans le plan  $(T, X)$ , quelle est la forme des courbes représentant la relation précédente ? Exprimer la pente des segments de droite en fonction des données.

**Q4.** Quel est le signe de la pente dans le cas d'une réaction endothermique ? exothermique ?

**Q5.** Expliquer la méthode pour obtenir les points de fonctionnement du réacteur.

**Q6.** Comment étudier la stabilité des points de fonctionnement à partir des courbes thermochimiques et cinétiques tracées dans le plan  $(T, X)$  ?

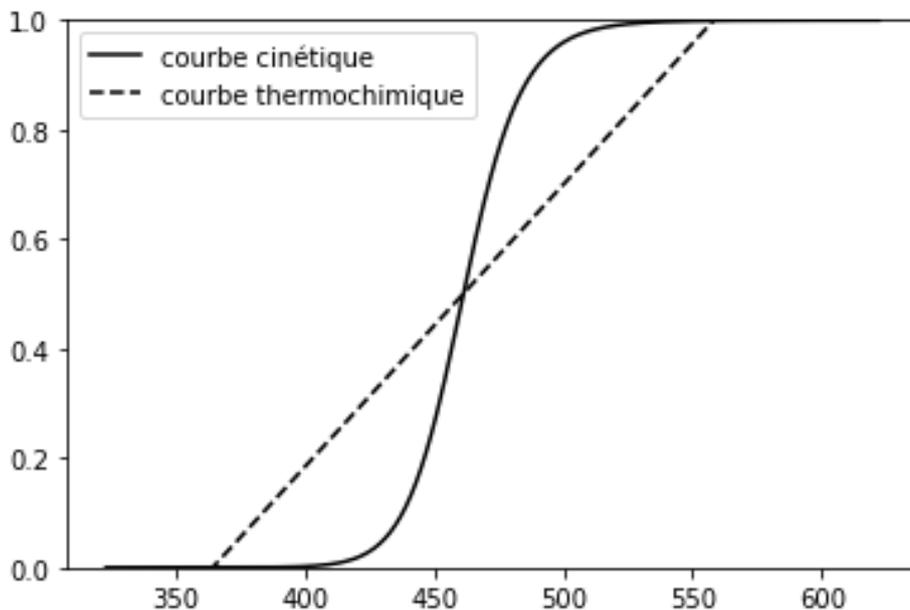
## III. Programmation

**Q7.** Compléter les données numériques en faisant les éventuelles conversions d'unités.

**Q8.** Coder une fonction  $X_{Cin}(T)$  traduisant l'équation cinétique.

**Q9.** De même, coder une fonction  $X_{Th}(T)$  traduisant l'équation thermochimique.

On obtient les courbes ci-dessous :



**Q10.** Estimer à l'aide des courbes, les valeurs destempératures de sortie possibles sous forme d'un encadrement de largeur 100 K.

**Q11.** Utiliser la fonction bisect de scipy.optimize pour déterminer précisément les températures de sortie puis les taux de conversion en sortie. On obtient :

```
In [5]: runfile('/Users/jerome/Desktop/décompo peroxyde tertiobutyle.py', wdir='/Users/jerome/Desktop')
91.0 0
188.0 50
285.0 100
```

**Q12.** Coder une fonction de dérivation retournant la dérivée d'une fonction f(x).

Le test sur la stabilité des points de fonctionnement conduit à :

```
In [7]: runfile('/Users/jerome/Desktop/décompo peroxyde tertiobutyle.py', Desktop')
91.0 0
188.0 50
285.0 100
True False True
```

**Q13.** Vérifier les résultats du code sur la stabilité des points de fonctionnement en comparant avec les impressions graphiques.

## Annexe 1 : programme Python à compléter

```
#!/usr/bin/env python3
# -*- coding: utf-8 -*-
"""
Created on Sat Apr 1 18:47:12 2023

@author: jerome
"""

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import scipy.optimize as spo

''' données relatives au problème'''

Ea = 157000 # J.mol-1
A = 1e15 # s-1
V = 0.5 # L
DV = A COMPLETER # L/s
tau = A COMPLETER
R = 8.314 # J/K/mol
rho = 900 # g/L
DeltaH0 = -150e3 # J/mol
cP = 2.1 #J/g/K
M = 146 # g/mol
Te = 200 + 273 # K
h = 80 # W/m**2/K
S = A COMPLETER # m2
T0 = 20 + 273 # K
```

```

''' équation cinétique '''

def XCin(T) :
    return A COMPLETER

''' équation thermochimique '''

def XTh(T) :
    return A COMPLETER

''' Tracé des courbes X(T) entre 50 et 350°C '''

lsT = [k for k in range (273+50,273+350)]
lsXCin = [XCin(T) for T in lsT]
lsXTh = [XTh(T) for T in lsT]

plt.plot(lsT, lsXCin, '-k', label = 'courbe cinétique')
plt.plot(lsT, lsXTh, '--k', label = 'courbe thermochimique')
plt.ylim((0,1))
plt.legend()
plt.show()

''' détermination des coordonnées des points de fonctionnement '''

Ts1 = spo.bisect(A COMPLETER)
Xs1 = XCin(Ts1)
print(round(Ts1-273, 0), round(100*Xs1))

Ts2 = spo.bisect(A COMPLETER)
Xs2 = XCin(Ts2)
print(round(Ts2-273, 0), round(100*Xs2))

Ts3 = spo.bisect(A COMPLETER)
Xs3 = XCin(Ts3)
print(round(Ts3-273, 0), round(100*Xs3))

''' étude de la stabilité de chaque point de fonctionnement'''

# Fonction de dérivation
epsilon = 0.01
def derive(f,x,epsilon):
    return A COMPLETER

# Puissance chimique
def Pchi(T):
    return DV*abs(DeltaH0)*rho*XCin(T)/M

# Puissance thermique
def Pphi(T):
    return DV*abs(DeltaH0)*rho*XTh(T)/M

# Fonction qui renvoie True si point de fonctionnement stable
def est_stable(T) :
    return derive(Pchi,T, epsilon) < derive(Pphi,T, epsilon)

print(est_stable(Ts1), est_stable(Ts2), est_stable(Ts3))

```