EXO 2 : φ gaz : $A + B \longrightarrow C$, réacteur Agité fermé. (4)

réaction d'ordre 1 / chaque gaz $n = 2$. $K = 0{,}097 \, L/mol.min$

$\begin{cases} P = cte = 10 \text{ bars.} \\ T = cte = 300K. \end{cases}$ à $t = 0$ $\begin{cases} V = V_0 \\ n_{A0} = 100 \text{ moles} \\ n_{B0} = 200 \text{ moles} \\ \text{Pas d'inerte.} \end{cases}$

1- Exprimer, le nombre de moles des Constituants en fonction de l'Avancement generalisé (X) et en fonctions du taux de Conversion de A (X_A) et de B (X_B).

Pour l'Avancement generalisé : $\boxed{n_j = n_{j0} + \nu_j \, n_0 X.}$

on remplace j par A, B, C. et $\nu_A = -1$, $\nu_B = -1$, $\nu_C = +1$

$\Rightarrow \begin{cases} n_A = n_{A0} - n_0 X & \text{.... (1)} \\ n_B = n_{B0} - n_0 X. & \text{.... (2)} \\ n_C = n_{C0} + n_0 X = n_0 X \text{ car } n_{C0} = 0 & \text{.... (3)} \end{cases}$

Pour le taux de Conversion de A.

$\boxed{n_j = n_{j0} + \nu_j \dfrac{n_{A0} X_A}{-\nu_A}}$. on remplace j par A, B, C et $\nu_A = -1$ $\nu_B = -1$, $\nu_C = +1$ avec $-\nu_A = +1$.

$\begin{cases} n_A = n_{A0} - n_{A0} X_A. & (4) \\ n_B = n_{B0} - n_{A0} X_A. & (5) \\ n_C = n_{C0} + n_{A0} X_A = n_{A0} X_A \text{ car } n_{C0} = 0. & (6) \end{cases}$

Pour le taux de Conversion de B.

$\boxed{n_j = n_{j0} + \nu_j \dfrac{n_{B0} X_B}{-\nu_B}}$ on remplace j par A, B, C $\nu_A = -1$ $\nu_B = -1$ et $\nu_C = +1$

$\begin{cases} n_A = n_{A0} - n_{B0} X_B & \text{--- (7)} \\ n_B = n_{B0} - n_{B0} X_B & \text{--- (8)} \\ n_C = n_{C0} + n_{B0} X_B = n_{B0} X_B & \text{--- (9)} \end{cases}$

car $n_{C0} = 0$

nous disposants donc de 9 équations

* relation entre X et X_A et X_B.

* relation entre X et X_A.

de (1) et (4)
$$\left\{\begin{array}{l} n_A = n_{A0} - n_0 X \\ n_A = n_{A0} - n_{A0} X_A \end{array}\right\} \Rightarrow n_0 X = n_{A0} X_A. \quad \boxed{X = \frac{n_{A0}}{n_0} X_A.}$$

mais $n_0 = n_{A0} + n_{B0} = 100 + 200 = 300$ moles. c.a.d : $n_0 = 3 n_{A0}$.

$$\Rightarrow X = \frac{n_{A0}}{3 n_{A0}} X_A = \boxed{\frac{1}{3} X_A = X.}$$

* relation entre X et X_B

de (2) et (8)
$$\left\{\begin{array}{l} n_B = n_{B0} - n_0 X \\ n_B = n_{B0} - n_{B0} X_B \end{array}\right\} \Rightarrow n_0 X = n_{B0} X_B \Rightarrow \boxed{X = \frac{n_{B0}}{n_0} X_B.}$$

mais $n_{B0} = 2 \cdot n_{A0}$
$n_0 = 3 n_{A0}$ $\Rightarrow X = \frac{2 n_{A0}}{3 n_{A0}} X_B \Rightarrow \boxed{X = \frac{2}{3} X_B}$

car $\left\{\begin{array}{l} n_{B0} = 200 \text{ moles} \\ n_{A0} = 100 \text{ moles} \\ n_0 = 300 \text{ moles} = n_{A0} + n_{B0} \end{array}\right.$

$\cancel{X = n_{A0}}$ $\quad X = \frac{1}{3} X_A = \frac{2}{3} X_B \Rightarrow \boxed{X_A = 2 X_B}$

2- Determination du constituant limite (clé).

$$\frac{n_{A0}}{-\nu_A} = \frac{100}{-(-1)} = 100. < \frac{n_{B0}}{-\nu_B} = \frac{200}{-(-1)} = 200$$

Le constituant limite ou bien le reactif clé dans ce cas est A

la valeur de l'Avancement X_f.

Comme A est le reactif clé, donc c'est ce reactif qui sera totalement consommé avant le reactif B.

Donc la reaction s'arrêtera quant $n_A = 0$.

à partir donc de l'équation (1).

$$n_A = n_{A0} - n_0 X \Rightarrow 0 = n_{A0} - n_0 X_f \Rightarrow X_f = \frac{n_{A0}}{n_0} = \frac{n_{A0}}{3 n_{A0}} = \frac{1}{3}$$

$$\boxed{X_f = \frac{1}{3}}$$

3- expression du temps necessaire pour obtenir un avancement final X_f: (6)

Le Bilan de matière dans un reacteur agité fermé (batch)

$$\boxed{\frac{dn_A}{dt} = r_A \cdot V} \quad \text{et} \quad r = \frac{r_A}{\nu_A} \Rightarrow \begin{cases} r_A = \nu_A r \\ \nu_A = -1 \end{cases} = \boxed{-r = r_A}$$

reaction d'ordre 1 / chaque reactif : $r = k\, C_A C_B \Rightarrow r_A = -k\, C_A . C_B$

$\Rightarrow n = 2$

$$C_A = \frac{n_A \rightarrow \text{var}}{V \rightarrow \text{var}} \qquad C_B = \frac{n_B \rightarrow \text{var}}{V \text{ variable}}$$

$$\frac{dn_A}{dt} = r_A . V = -k\, C_A C_B . V.$$

$$\boxed{n_j = n_{j0} + \nu_j n_0 X \quad \text{et} \quad V = V_0 \beta (1 + \varepsilon X)}$$

$$\boxed{n_A = n_{A0} - n_0 X} \qquad \boxed{V = V_0\, 1 . (1 - X)}$$

$$\boxed{n_B = n_{B0} - n_0 X}$$

car $\beta = \frac{P_0 T}{P T_0} = 1$ $\quad P = cte$, $T = cte$

$$\frac{dn_A}{dt} = \frac{d(n_{A0} - n_0 X)}{dt} \qquad \varepsilon = \frac{\Delta \alpha'}{1 + I} = \frac{\Delta \alpha}{1 + \frac{n_I}{n_0}} = \Delta \alpha$$

$$\boxed{\frac{dn_A}{dt} = -n_0 \frac{dX}{dt}} \qquad \Delta \alpha = 1 - (1+1) = -1.$$

$$\Rightarrow \boxed{\varepsilon = -1} \Rightarrow \boxed{V = V_0 (1 - X)}$$

le volume diminu avec le temps.

$$\left\{ \begin{aligned} C_A &= \frac{n_A}{V} = \frac{n_{A0} - n_0 X}{V_0 (1 - X)} \\ C_B &= \frac{n_B}{V} = \frac{n_{B0} - n_0 X}{V_0 (1 - X)} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \frac{dn_A}{dt} = r_A . V \text{ sera:} \quad \frac{dn_A}{dt} = -k\, C_A C_B V.$$

$$\boxed{-\frac{n_0\, dX}{dt} = -k \frac{n_{A0} - n_0 X}{V_0 (1 - X)} \cdot \frac{n_{B0} - n_0 X}{V_0 (1 - X)} \cdot V_0 (1 - X)}$$

Après simplification

$$\frac{n_0\, dx}{dt} = k \frac{(n_{A_0} - n_0 x)(n_{B_0} - n_0 x)}{v_0 (1 - x)}$$

on remplace $\begin{cases} n_0 = 3 n_{A_0} \\ n_B = 2 n_{A_0} \end{cases} \Rightarrow \frac{3 n_{A_0} dx}{dt} = \frac{k.(n_{A_0} - 3 n_{A_0} x)(2 n_{A_0} - 3 x)}{v_0 (1 - x)}$

$$\Rightarrow \frac{3 n_{A_0} dx}{dt} = \frac{k\, n_{A_0}(1 - 3x) \cdot n_{A_0}(2 - 3x)}{v_0 (1 - x)}$$

$$\Rightarrow \boxed{3 \frac{dx}{dt} = \frac{k\, n_{A_0} (1 - 3x)(2 - 3x)}{v_0 (1 - x)}}$$

ou bien

$$\frac{dx}{dt} = \frac{k\, n_{A_0}}{3 v_0} \frac{(1 - 3x)(2 - 3x)}{1 - x}$$

$$\Rightarrow dt = \frac{3 v_0}{k\, n_{A_0}} \cdot \frac{(1 - x)}{(1 - 3x)(2 - 3x)} dx$$

on integre $\begin{cases} \text{le temps de } 0 \text{ à } t_f \\ \text{L'avancement generalise de } 0 \text{ à } x_f. \end{cases}$

$$\Rightarrow \boxed{\int_0^{t_f} dt = \frac{3 v_0}{k\, n_{A_0}} \underbrace{\int_0^{x_f} \frac{(1 - x)}{(1 - 3x)(2 - 3x)} dx}_{Int} = t_f}$$

le calcul de l'Integrale, necessite l'utilisation de la méthode de decomposition en fraction simple:

$$Int = \int_0^{x_f} \frac{(1 - x)\, dx}{(1 - 3x)(2 - 3x)} = \int_0^{x_f} \frac{\alpha\, dx}{(1 - 3x)} + \int_0^{x_f} \frac{\beta\, dx}{(2 - 3x)}$$

on calcul donc α, et $\underline{\underline{\beta}}$.

Par Analogie : $\alpha(2-3X)+\beta(1-3X) \equiv 1-X$

$$\Rightarrow 2\alpha - 3\alpha X + \beta - 3\beta X \equiv 1-X$$

$$(-3\alpha-3\beta)X + (2\alpha+\beta) \equiv 1-X$$

$$\left.\begin{cases} -3\alpha - 3\beta \equiv -1 \\ 2\alpha + \beta \equiv 1 \end{cases}\right\} \Rightarrow \boxed{\begin{matrix} \alpha = \frac{2}{3} \\ \beta = -\frac{1}{3} \end{matrix}}$$

on remplace α et β dans l'integral

$$Int = \int_0^{X_f} \frac{\left(\frac{2}{3}\right) dX}{(1-3X)} + \int_0^{X_f} \frac{\left(-\frac{1}{3}\right) dX}{(2-3X)}$$

$$Int = \frac{2}{3}\int_0^{X_f} \frac{dX}{(1-3X)} - \frac{1}{3}\int_0^{X_f} \frac{dX}{(2-3X)}$$

$$\Rightarrow \int_0^{X_f} \frac{dX}{1-3X} = \left(-\frac{1}{3}\right)\ln(1-3X)\Big|_0^{X_f} = \boxed{\left(-\frac{1}{3}\right)\ln(1-3X_f)}$$

$$\int_0^{X_f} \frac{dX}{2-3X} = -\frac{1}{3}\ln(2-3X)\Big|_0^{X_f} = \boxed{-\frac{1}{3}\left[\ln(2-3X_f) - \ln 2\right]}$$

$$Int = \left(\frac{2}{3}\right)\left(-\frac{1}{3}\right)\ln(1-3X_f) - \left(\frac{1}{3}\right)\left(-\frac{1}{3}\right)\left[\ln(2-3X_f) - \ln 2\right]$$

$$= \left(-\frac{2}{9}\right)\ln(1-3X_f) + \left(\frac{1}{9}\right)\left[\ln(2-3X_f) - \ln 2\right]$$

$$Int = \frac{1}{9}\left[\ln(2-3X_f) - 2\ln(1-3X_f) - \ln 2\right]$$

mais $\left.\begin{cases} n\ln x = \ln x^n \\ \ln a + \ln b = \ln(a.b) \\ \ln a - \ln b = \ln\frac{a}{b} \end{cases}\right\} \Rightarrow \boxed{Int = \frac{1}{9}\left[\ln\frac{(2-3X_f)}{2(1-3X_f)^2}\right]}$

finalement l'expression du temps final t_f

$$t_f = \frac{3v_0}{k n_{A0}} \cdot Int = \boxed{\frac{v_0}{3 k n_{A0}}\left[\ln\frac{(2-3X_f)}{2(1-3X_f)^2}\right]} = t_f$$

Sachant que $0 < x_f < x_\ell$ avec $x_\ell = 1/3$ (9)

$0 < x_f < x_e \Rightarrow$ $0 \leq x_f \leq 1/3$

$0 < x_f < x_e = 1/3$.

4- Determination du temps de la réaction pour $X_A = 0,9$.

On a :

$$t_f = \frac{V_0}{3 k n_{A0}} \ln \frac{(2-3x_f)}{2(1-3x_f)^2}$$

et mais $x_f = \frac{1}{3} X_A \Rightarrow x_f = \frac{1}{3} 0,9 = \boxed{0,3 = x_f}$

Pour pouvoir calculer t_f il faut d'abord trouver $\underline{V_0}$.

à $t=0$

$$P_0 . V_0 = n_0 R T_0 \Rightarrow V_0 = \frac{n_0 R T_0}{P_0} = \frac{300 . 8,31 . 300}{10 . 10^5} = 0,748 \, m^3$$

le volume initial V_0 :

$V_0 = 748 \ell$

$$\Rightarrow t_f = \frac{748}{3 . 0,097 . 100} \ln \frac{(2 - 3.0,3)}{2(1-3.0,3)^2}$$

$$\boxed{t_f = 103 \, min}$$