

République algérienne démocratique et populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université Echahid Hamma Lakhdar -El Oued-



Faculté de Technologie
Département Génie des Procédés et Pétrochimie

Cours Génie de la réaction II :

Réacteurs Poly-phasiques

Destiné aux étudiants d'un master en génie chimique

Préparé par : Dr. Ben Seghir Bachir

2024-2023

Résumé

La conception du réacteur utilise des informations, des connaissances et de l'expérience de divers domaines - thermodynamique, cinétique chimique, mécanique des fluides, transfert de chaleur, transfert de masse et économie. L'ingénierie des réactions chimiques est la synthèse de tous ces facteurs dans le but de concevoir correctement un réacteur chimique. Pour savoir ce qu'un réacteur est capable de faire, nous devons connaître la cinétique, le schéma de contact et l'équation de performance. Il existe de nombreuses façons de classer les réactions chimiques. En génie des réactions chimiques, le schéma le plus utile est probablement la classification en fonction du nombre et du type de phases impliquées, la grande division étant entre les systèmes homogènes et hétérogènes. Une réaction est homogène si elle a lieu dans une seule phase. Une réaction est hétérogène si elle nécessite la présence d'au moins deux phases pour se produire à la vitesse à laquelle elle se produit. Peu importe si la réaction a lieu dans une, deux ou plusieurs phases ; à une interface ; ou si les réactifs et les produits sont répartis entre les phases ou sont tous contenus dans une seule phase. Tout ce qui compte, c'est qu'au moins deux phases sont nécessaires pour que la réaction se produise comme elle le fait.

Mot clé : Réacteur chimique - Hétérogène- Interface- Classification- Vitesse- Phases

Nomenclature

Symbole	Définition	Unités -IS-
N_i	Flux de transfert par unit de volume	$\text{mol} / \text{s.m}^2$
C_i^E	Concentration à l'équilibre de phase I	mol / m^3
C_i	Concentration de phase I	mol / m^3
K_{iL}	Coefficient globale de transfert de matière	m/s
K_i	Coefficient de transfert de matière de film	m/s
k	Constante de vitesse de réaction	Variable
m	Pente de la droit d'équilibre	--
p	Ordonnée à l'origine de la droit d'équilibre	mol / m^3
C_i	Concentration à l'interface de phase	mol / m^3
D_i	Coefficient de diffusion moléculaire	m^2/s
P_i	Pression partielle de composé A_j	Pa
R	Constante de gaz parfaits	8.31 J/mol.K
T	Température	K
K_{jG}	Coefficient de transfert (matière , globale)(gaz)	$\text{mol} / \text{sm}^2.\text{Pa}$
C_{ib}	Désignant la Concentration de A_j au Cœur de deux phase (I, II)	mol / m^3
σ	Épaisseur du film (I, II)	m
r	Vitesse de réaction chimique	$\text{mol} / \text{m}^3.\text{s}$
Ha	Nombre de Hatta	--
N_i'	Flux de transfert avec réaction chimique	$\text{mol} / \text{m}^2.\text{s}$
N_i	Flux de transfert sous réaction chimique	$\text{mol} / \text{m}^2.\text{s}(\text{mol} / \text{s})$
$Th ; tg ; tan$	Tangent hyperbolique	--
$Ch ; cos ;$	Cosinus hyperbolique	--
$Sh ; sin$	sinus hyperbolique	--
N_3	Nombre adimensionnelle	--
N_2	Nombre adimensionnelle	--
B	Nombre adimensionnelle	--
F	Fraction de réactifs disparaissant dans le film	--

X	Distance du plan le film mesurée à partir d'interface	m
Z	Distance du plan de réaction à l'interface dans le cas des réactions instantanées	m
E	Facteur d'accélération	--
A_s	Aire de surface d'échange par unité de volume	m^2/m^3
A_p	Aire géométrique de garnissage	m^2/m^3
A_s	Aire de surface externe de particules par unité de volume	m^2/m^3

SOMMAIRE

Introduction.....	5
Chapitre I : Réacteurs à deux phases fluide- fluide	
I.1. Rappel de la théorie des deux films.....	8
I.2. Transfert de masse accompagné de réaction chimique.....	12
I.2. 1. Réaction irréversible et isotherme dans une seule phase et transfert en direction de la phase réactionnelle.....	12
I.2.1.1. Cas général.....	13
I.2.1.2. Réaction de pseudo-premier ordre.....	14
I.2.1.3. Réaction d'ordre 2.....	17
I.2.1.4. Réaction instantanée.....	21
I.2.2. Calcul du flux local de composé transféré de phase I en phase II	22
I.2.3. La notion d'efficacité dans un système réactionnel a deux phases fluides (d'ordre 1)	23
I.3. Calcul d'un réacteur a deux phases fluides.....	24
I.3.1. Réacteur discontinu à deux phases fluides.....	25
I.3.2. Réacteur tubulaire à deux phases fluides.....	28
I.3.3. Réacteur parfaitement agité à deux phases fluides.....	31
Chapitre II : Réacteurs fluide-solide catalytique	
II.1. Diffusion intra particulaire.....	34
II.1.1. Le grain solide.....	34
II.1.2. Influence de la diffusion interne sur la réaction.....	35
II.1.3. Influence de la diffusion externe sur la réaction.....	40
II.2. Les réacteurs mettant en jeu une phase fluide et une phase solide catalytique lit fixe et lit fluidisé.....	42
II.2. 1. Réacteur a catalytique lit fixe.....	42
II.2. 2. Réacteur a catalytique lit fluidisé.....	44
Chapitre III : Réacteurs fluide- solide non catalytique	
III.1. Classification : Les réactions polyphasiques fluide-solide non catalytiques sont classées en.....	47
III.1.1. La taille du solide est invariable.....	47
III.1.2. La taille de solide est variable.....	47

III.1.3.	Modèle de réaction.....	47
III.1.4.	Modèle à cœur rétrécissant.....	47
III.1.5.	Modèle à cœur rétrécissant pour des particules sphérique de taille fixe.....	48
III.2.	Contrôle cinétique par la diffusion de A dans film fluide (régime externe)	48
III.2.1.	Régime de diffusion interne (dans le couche de cendres).....	51
III.2.1.1.	Régime chimique.....	53
III.2.1.2.	Régime mixte.....	53
III.3.	Taille variable	54
III.3.1.	Régime chimique.....	54
III.3.2.	Régime dans le film (externe).....	55
	Exercices appliqué	56

Références

Annexes

Introduction :

Chaque processus chimique industriel est conçu pour produire de manière économique un produit souhaité à partir d'une variété de matières premières à travers une succession d'étapes de traitement. Les matières premières subissent plusieurs étapes de traitement physique pour les mettre sous forme dans laquelle elles peuvent réagir chimiquement. Ensuite, elles passent par le réacteur. Les produits de la réaction doivent ensuite subir un traitement physique supplémentaire - séparations, purifications, etc. pour obtenir le produit final souhaité.

La conception du réacteur n'est pas une affaire routinière, et de nombreuses alternatives peuvent être proposées pour un processus donné. En recherchant l'optimum, ce n'est pas seulement le coût du réacteur qui doit être minimisé. Un design peut avoir un faible coût de réacteur, mais les matériaux sortant de l'unité peuvent nécessiter un traitement beaucoup plus coûteux que les designs alternatifs. Par conséquent, l'économie du processus global doit être prise en compte.

La conception du réacteur utilise des informations, des connaissances et de l'expérience de divers domaines - thermodynamique, cinétique chimique, mécanique des fluides, transfert de chaleur, transfert de masse et économie. L'ingénierie des réactions chimiques est la synthèse de tous ces facteurs dans le but de concevoir correctement un réacteur chimique.

Pour savoir ce qu'un réacteur est capable de faire, nous devons connaître la cinétique, le schéma de contact et l'équation de performance. Il existe de nombreuses façons de classer les réactions chimiques. En génie des réactions chimiques, le schéma le plus utile est probablement la classification en fonction du nombre et du type de phases impliquées, la grande division étant entre les systèmes homogènes et hétérogènes. Une réaction est homogène si elle a lieu dans une seule phase. Une réaction est hétérogène si elle nécessite la présence d'au moins deux phases pour se produire à la vitesse à laquelle elle se produit. Peu importe si la réaction a lieu dans une, deux ou plusieurs phases ; à une interface ; ou si les réactifs et les produits sont répartis entre les phases ou sont tous contenus dans une seule phase. Tout ce qui compte, c'est qu'au moins deux phases sont nécessaires pour que la réaction se produise comme elle le fait.

Les réactions hétérogènes entre fluides sont réalisées pour l'une des trois raisons suivantes. Tout d'abord, le produit de la réaction peut être une matière souhaitée. De telles réactions sont nombreuses et se trouvent pratiquement dans tous les domaines de l'industrie chimique où les synthèses organiques sont employées. Un exemple de réactions liquide-

liquide est la nitration de composés organiques avec un mélange d'acide nitrique et d'acide sulfurique pour former des matériaux tels que la nitroglycérine. La chloration du benzène liquide et d'autres hydrocarbures avec du chlore gazeux est un exemple de réactions gaz-liquide.

Cette liste n'est bien sûr pas exhaustive. Dans chaque cas, se posent les questions suivantes : quelles données sont nécessaires ? Quelles expériences en laboratoire et quels essais industriels doivent être réalisés ?

Inversement, le chercheur qui s'intéresse à la compréhension fondamentale d'une réaction doit réfléchir au choix du réacteur et des conditions expérimentales nécessaires pour obtenir les informations souhaitées. Par exemple, comment mesurer la vitesse de réaction sans être perturbé par les phénomènes de transfert de matière et de chaleur simultanés ? Ce sont quelques-unes des questions auxquelles le génie de la réaction chimique cherche à répondre. La plupart d'entre elles exigent l'établissement d'un modèle mathématique du réacteur chimique, spécifiquement adapté à l'objectif visé.

Dans ce manuscrit, nous passons en revue les principes de base qui guident le fonctionnement des réacteurs et la création de tels modèles. Nous avons souhaité que ce manuscrit soit à la fois un traité complet et un manuel pratique. Il constitue un traité en raison de la richesse et de l'étendue des concepts visant à définir et à optimiser le réacteur qui se rapproche le plus du modèle idéal pour chaque cas. Par ailleurs, sa présentation claire et sa facilité d'utilisation en font un manuel pratique et efficace. Nous avons cherché à répondre aux préoccupations de nos étudiants en génie des procédés, qu'il s'agisse de calculs, de conception ou d'exploitation des installations, et à en faire un outil de soutien dans leur formation.

Chapitre I

Réacteurs à deux phases fluide- fluide

I.1. Rappel de la théorie des deux films :

Considérons deux phases fluides **I** et **II** séparées par une interface. Si les deux phases ne sont pas en équilibre de concentration pour au moins l'un des composés **Ai**, il y aura migration de ce composé **Ai** d'une phase vers l'autre avec franchissement de l'interface. Le transfert de **Ai** prendra fin lorsque les deux seront en équilibre de concentration en composé **Ai**.

Nous allons examiner une situation où le transfert de **Ai** se fait de la **phase I**, où sa concentration est C_{II} , vers la **phase II**, où sa concentration C_{III} ; pour plus de commodité dans la présentation, imaginons que les concentrations C_{II} et C_{III} soient constantes dans le temps.

La loi de transfert la plus simple que l'on puisse imaginer pour exprimer le flux de **Ai** est :

$$N_i = K_{II}(C_{II} - C_{II}^E)$$

Où N_i est le flux de **Ai** de la **phase I** vers la **phase II**, exprimé dans le système d'unités **SI** en moles de **Ai** /s. m² d'aire interfaciale (mol/s.m²).

C_{II}^E est la concentration à l'équilibre, c'est-à-dire, la concentration qui régnerait en **phase I** si cette dernière était en équilibre avec la **phase II**, où règne la concentration C_{III} .

Si on exprime les concentrations C_i en mol/m³, il vient K_{II} en m/s.

Le coefficient global de transfert K_{II} a la dimension d'une vitesse. Il est également possible d'exprimer le flux de transfert en se rapportant à la phase réceptrice (ici **phase II**) puisque, en régime établi, le flux qui quitte la phase I est égale au flux qui atteint la **phase II**.

Ainsi on écrit :

$$N_i = K_{III}(C_{III}^E - C_{III})$$

C_{III}^E est la concentration en composé **Ai** qui régnerait en phase II, si celle-ci était en équilibre de concentration avec la phase I où règne la concentration C_{II} .

La relation d'équilibre entre les concentrations deux phases sera généralement traduite par une courbe dans un graphique C_{II} en fonction de C_{III} , comme il apparaît sur la **Figure (1)** suivant :

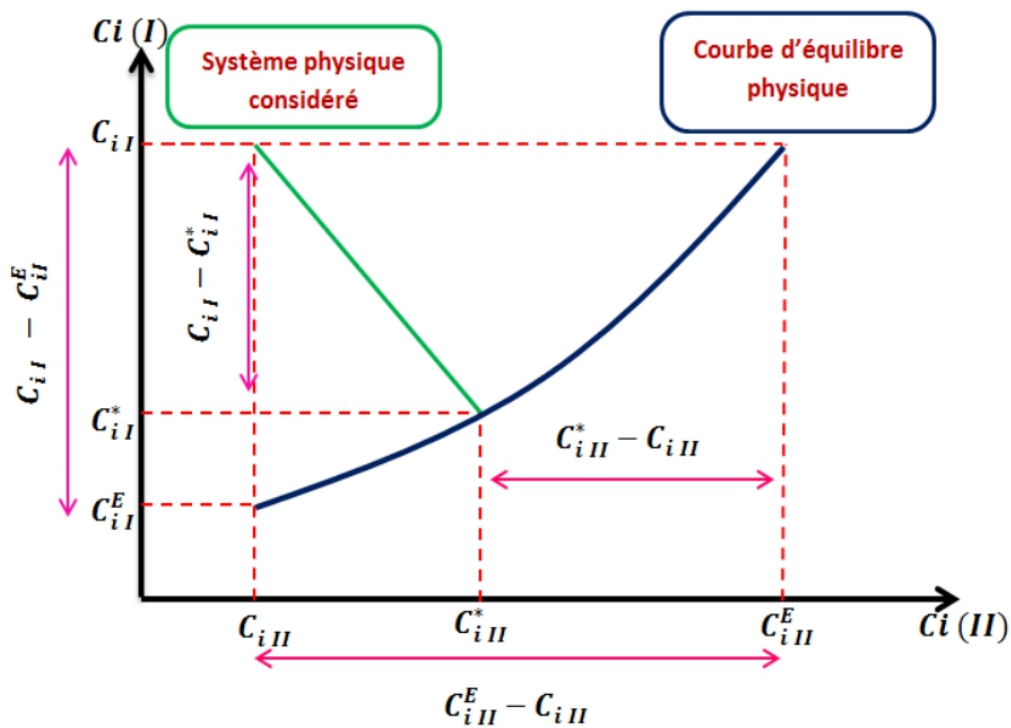


Figure (1) : illustration des écarts à l'équilibre durant un transfert entre deux phases fluides.

D'après les définitions de C_{II}^E et C_{III}^E nous aurons alors :

$$C_{II}^E = m C_{II} + \rho$$

$$C_{II} = m C_{III}^E + \rho \quad \text{C'est-à-dire} \quad C_{III}^E = \frac{C_{II} - \rho}{m}$$

Il est aisé montrer que $K_{III} = m K_{II}$.

Il est encore d'autres expressions du flux. En effet, en admet généralement que l'équilibre est exactement à l'interface. Si on appelle C_{II}^* et C_{III}^* les concentrations à l'interface coté phase I et coté phase II, on peut définir le flux par :

$$N_i = k_{II}(C_{II} - C_{II}^*)$$

Ou par :

$$N_i = k_{III}(C_{III}^* - C_{III})$$

Introduisant ainsi d'autres coefficients de transfert k_{II} et k_{III} , que nous serons amenés à appeler coefficient de transfert de film, en **phases I** et **II** respectivement, et ayant également la dimension d'une vitesse. On peut montrer que :

$$\frac{1}{K_{II}} = \frac{1}{k_{II}} + \frac{m}{k_{III}}$$
$$\frac{1}{K_{III}} = \frac{1}{k_{III}} + \frac{1}{m k_{II}}$$

Dans la suite de texte, pour des raisons de commodité dans la présentation, nous utiliserons surtout l'expression :

$$N_i = k_{III}(C_{III}^* - C_{III})$$

Plusieurs théories ont été proposées en vue d'expliciter une loi phénoménologique du transfert et particulier de relier coefficient de transfert aux caractéristique physico-chimiques des phases en présence et aux conditions hydrodynamiques de leur écoulement.

Les films sont supposés immobiles et d'épaisseur δ_I et δ_{II} . Par application de la **loi de Fick** relative au transfert par diffusion moléculaire on écrit :

$$N_i = \mathcal{D}_{II} \left(\frac{C_{II} - C_{II}^*}{\delta_I} \right) = \mathcal{D}_{III} \left(\frac{C_{III}^* - C_{III}}{\delta_{II}} \right)$$

(1) Notons que la théorie du double film implique que les épaisseurs (δ_I et δ_{II}) soient les mêmes quelle que soit l'espèce A_i transférée considérée et même s'il y a plusieurs espèces transférées simultanément.

$\mathcal{D}_{II}$ et $\mathcal{D}_{III}$ étant les coefficients de diffusion moléculaire de A_i , en **phase I** et en **phase II** respectivement (m^2/s). On en déduit :

$$\frac{1}{k_{II}} = \frac{\mathcal{D}_{II}}{\delta_I}$$
$$\frac{1}{k_{III}} = \frac{\mathcal{D}_{III}}{\delta_{II}}$$

On peut remarquer que les équations traduisent bien l'addition de deux résistances localisées dans chacune des phases fluides.

Au cas où la **phase I** est une phase gazeuse, on utilise souvent des pressions partielles p_i au lieu des concentrations C_i . Les expressions des flux deviennent alors (**Figure (2)**) :

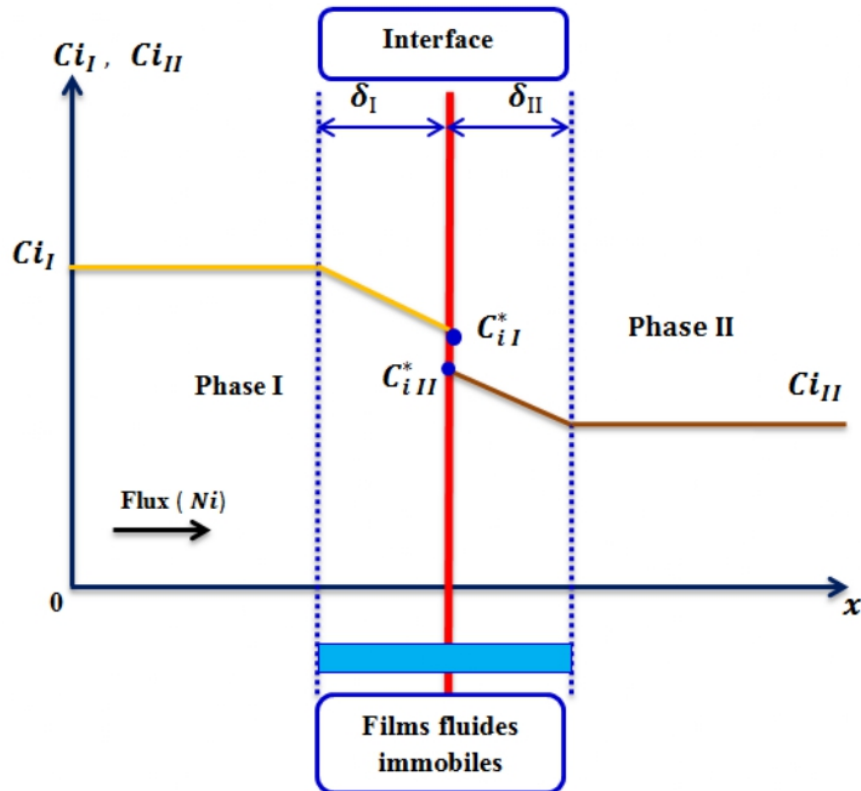


Figure (2) : théorie des deux films. Schéma indiquant les profils des concentrations de part et d'autre de l'interface.

$$N_i = K_{iI}(C_{iI} - C_{iI}^E) = K_{iG}(p_{iG} - p_{iG}^E) = k_{iI}(C_{iI} - C_{iI}^*) = k_{iG}(p_{iI} - p_{iG}^*)$$

Sachant que, pour des gaz parfaits, $C_i = p_i/RT$, on voit que :

$$\frac{K_{iI}}{K_{iG}} = \frac{k_{iI}}{k_{iG}} = RT$$

Les dimensions de K_{iG} et k_{iG} sont $\text{mol/s} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{Pa}$.

I.2. Transfert de masse accompagné de réaction chimique :

Nous étudierons maintenant les perturbations apportées au phénomène de transfert de masse par le déroulement de la réaction chimique, affecte de ce fait le flux de transfert vers la phase où se déroule la réaction.

I.2. 1. Réaction irréversible et isotherme dans une seule phase et transfert en direction de la phase réactionnelle :

Soit une **phase I** contenant un composé **A₁** et une **phase II** contenant un composé **A₂**. On supposera que le composé **A₁** est transféré de la **phase I** vers la **phase II** et que dans cette dernière se déroule la réaction irréversible :



La vitesse de la réaction dans la phase II, à l'endroit où règnent les concentrations **C_{1I}** et **C_{1II}** pourra s'exprimer de la manière classique en moles par seconde et par **m³** de phase réactionnelle :

$$r = f(C_{1I}, C_{1II}) \quad (\text{mol}/\text{m}^3 \cdot \text{s})$$

Pour la suite nous serons amenés à considérer trois notations distinctes pour la concentration **C_{1II}** :

- ➔ Soit **C_{1II}**, désignant la concentration de **A_i** en un point quelconque de la **phase II**, comme il apparaît par exemple dans l'expression de vitesse précédente;
- ➔ Soit **C_{1IIb}** désignant la concentration de **A_i** **au coeur** de la **phase II**, au-delà du film;
- ➔ Soit **C_{1II(x)}** désignant la concentration de **A_i** en un point du film situé à la distance **x** de l'interface.

Nous aurons bien entendu : **C_{1II}(δ_{II}) = C_{1IIb}**

L'indice **phase II** pourra être omis, car le traitement qui suit ne se rapporte qu'à la phase réactionnelle **phase II** (**Figure (3)**).

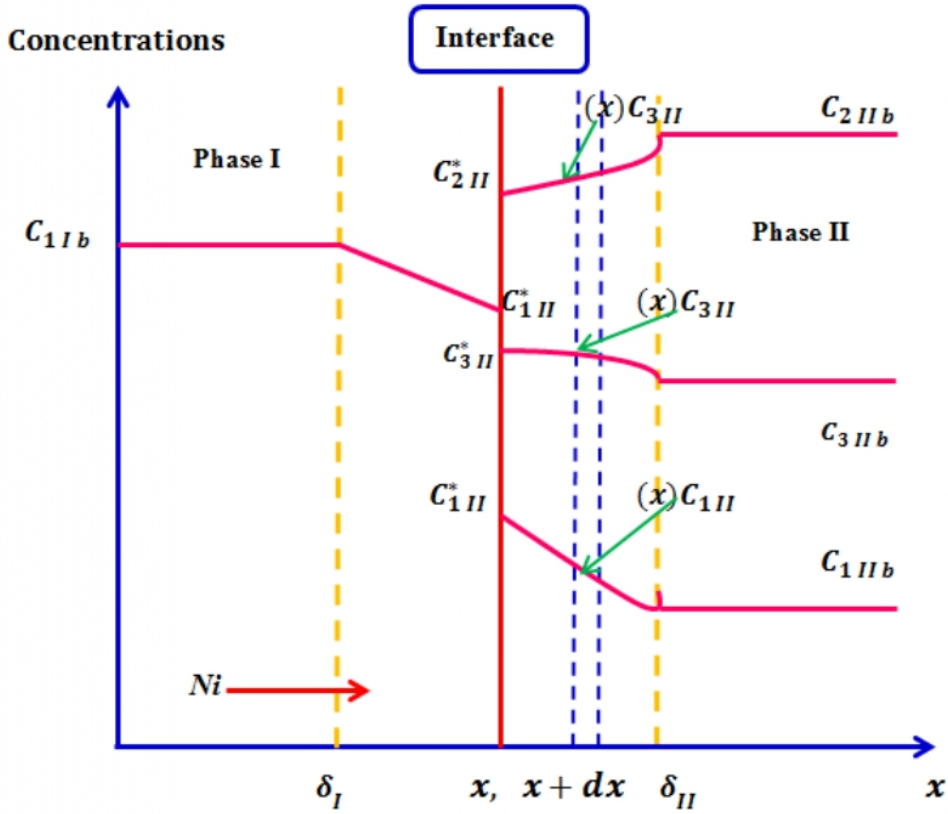


Figure (3): Profils de concentration des constituants A_1, A_2, A_3 dans le film de **phase II**, dans le cas d'un transfert du constituant A_1 participant à la réaction chimique en **phase II** répondant à la relation stœchiométrique : $\alpha_1 A_1 + \alpha_2 A_2 \rightarrow \alpha_3 A_3$

I.2.1.1. Cas général :

Écrivons un bilan matière pour un composé A_i , pour une tranche de film d'épaisseur dx et pour une section unitaire d'aire interfaciale, en appliquant la **loi de Fick** relative à la diffusion moléculaire dans les milieux quasi-immobiles :

Flux de A_i entrant à l'abscisse $x + dx$ quantité de A_i disparaissant par unité de temps = flux de A_i sortant à l'abscisse $x + dx$.

$$-D_{iI} \left[\frac{dC_i(x)}{dx} \right]_x + v_i r dx = -D_{iI} \left[\frac{dC_i(x)}{dx} \right]_{x+dx}$$

Si l'on fait tendre dx vers 0, nous pouvons écrire pour chaque composé A_i :

$$D_{iI} \left[\frac{d^2 C_i(x)}{dx^2} \right] + v_i r = 0$$

Les conditions aux limites seront :

$$C_i(\delta) = C_{ib} \text{ pour } x = \delta$$

$$C_i(0) = C_i^* \text{ pour } x = 0$$

Rappelons que δ est selon la théorie des deux films l'épaisseur du film de phase II définie par $D_1/k_1 = D_2/k_2 \dots D_i/k_i$; ($k_1, k_2, \dots, k_i$ les coefficients de transfert de film côté phase II définis pour le cas du transfert sans **réaction chimique**).

I.2.1.2. Réaction de pseudo-premier ordre :

Examinons alors le cas d'une réaction irréversible, d'ordre 1 par rapport à chacun des deux réactif [$r = kC_{1(x)}C_{2(x)}$] et où l'on peut considérer que $C_{2(x)} = \text{constant dans le film} = C_{2b}$ (nous verrons plus loin ce que recouvre cette hypothèse).

$$D_{II} \left[\frac{d^2 C_i(x)}{dx^2} \right] + v_i r = 0$$

La solution générale s'écrit :

$$C_{2(x)} = \beta_1 e^{\rho x} + \beta_2 e^{-\rho x} \text{ avec } \rho = \sqrt{\frac{-v_1 k C_{2b}}{D_1}}$$

Les conditions limites permettent de calculer β_1 et β_2 :

$$\beta_1 + \beta_2 = C_1^*$$

$$C_{1b} = \beta_1 e^{\rho \delta} + \beta_2 e^{-\rho \delta}$$

Et la concentration $C_{1(x)}$ dans le film :

$$C_{1(x)} = \frac{C_{1b} \sin[\rho \delta] + C_1^* \sin[\rho(\delta - x)]}{\sin[\rho \delta]}$$

Le gradient de $C_{1(x)}$ dans le film s'exprime alors par :

$$\frac{dC_1(x)}{dx} = \frac{\rho C_{1b} \cos[\rho \delta] + \rho C_1^* \cos[\rho(\delta - x)]}{\sin[\rho \delta]}$$

Nous pouvons en déduire le flux traversant l'interface en écrivant :

$$[N'_1]_{x=0}^{(2)} = -D_1 \left[\frac{dC_1(x)}{dx} \right]_{x=0} = \frac{D_1}{\delta} \frac{\rho \delta \cos[\rho \delta]}{\sin[\rho \delta]} \left[C_1^* - \frac{C_{1b}}{\cos[\rho \delta]} \right]$$

De la même manière, on peut calculer le flux à l'autre extrémité du film, pour $x = \delta$:

$$[N'_1]_{x=\delta} = -D_1 \left[\frac{dC_1(x)}{dx} \right]_{x=\delta} = k_1 \frac{\rho \delta}{\tan[\rho \delta]} \left[\frac{C_1^*}{\cos[\rho \delta]} - C_{1b} \right]$$

La notion N' sera utilisée pour exprimer le flux avec réaction chimique.

La notion N étant réservée à l'exprimer le flux sans réaction chimique.

Le groupement $p\delta = \frac{\sqrt{-\alpha_1 k C_{2b} D_1}}{k_1}$ est un nombre sans dimensions, que l'on appelle habituellement nombre de **Hatta (Ha)** pour rappeler que les calculs ci-dessus ont été établis pour la première fois par ce savant japonais.

$$Ha = p\delta = \frac{\sqrt{-\alpha_1 k C_{2b} D_1}}{k_1}$$

Le nombre de Hatta est un nombre sans dimension utilisé en cinétique chimique pour caractériser les réactions chimiques dans des milieux hétérogènes. Le rapport des flux avec et sans réaction chimique s'écrit :

La vitesse d'absorption de A_1 par unité de temps et par unité d'aire interfaciale, en présence de la (avec) réaction chimique, s'écrit :

$$[N'_1]_{x=0} = k_1 \frac{Ha}{\tan[Ha]} \left[C_1^* - \frac{C_{1b}}{\cos[Ha]} \right]$$

Si l'on se souvient que le flux sans réaction chimique peut s'exprimer par :

$$[N_1]_{x=0} = k_1 (C_1^* - C_{1b})$$

➡ Facteur d'accélération chimique :

Le rapport des flux avec et sans réaction chimique s'écrit :

$$E = \frac{[N'_1]_{x=0}}{[N_1]_{x=0}} = \frac{Ha}{tg[Ha]} \frac{1 - \frac{\frac{C_{1b}}{C_1^*}}{\cos[Ha]}}{1 - \frac{C_{1b}}{C_1^*}} = \frac{Ha}{tg[Ha]} \frac{1 - \frac{\mathcal{N}_3}{\cos[Ha]}}{1 - \mathcal{N}_3}$$

$\mathcal{N}_3$ étant le nombre sans dimensions $\frac{C_{1b}}{C_1^*}$.

➤ Fraction de réactif disparaissant dans le film :

Il est intéressant d'examiner la valeur du flux de A1 atteignant l'extrémité du film ($x = \delta$) et de rapporter sa valeur à celle du flux pénétrant dans le film ($x = 0$) .

En faisant :

$$\mathcal{F} = \frac{[N'_1]_{x=\delta}}{[N_1]_{x=0}}$$

On obtient :

$$\mathcal{F} = \frac{C_1^* - C_{1b} \cos[Ha]}{C_1^* - \cos[Ha] - C_{1b}} = \frac{1 - \mathcal{N}_3 \cos[Ha]}{\cos[Ha] - \mathcal{N}_3}$$

On distingue principalement trois régimes de fonctionnement :

➤ Réaction lente : $Ha < 0,3$

La réaction est plus lente que le transfert de matière. La réaction a lieu dans la phase réactionnelle :

Le flux d'absorption par unité d'aire interfaciale est proche de :

$$[N'_1]_{x=0} \approx [N_1]_{x=0} = k_1(C_1^* - C_{1b})$$

C'est-à-dire $E \approx 1$

➤ Réaction moyenne : $0,3 < Ha < 5$

La réaction est aussi rapide que le transfert de matière. La réaction commence dans l'interface et se poursuit dans la phase réactionnelle :

➤ Réaction rapide : $Ha > 5$

On peut admettre que $\mathcal{N}_3$ sera faible ; la réaction se passera quasi entièrement dans le film.
Dans ces conditions :

$$\mathcal{F} \approx \frac{1}{\cos[Ha]}$$

On note que la fraction du composé transféré qui atteint la frontière du film devient insignifiante dès que Ha atteint la valeur 5.

Le flux d'absorption par unité d'aire interfaciale s'écrira alors :

$$[N'_1]_{x=0} \approx k_1 Ha C_1^* = \sqrt{-\alpha_1 k C_{2b}} \mathcal{D}_1 C_1^*$$

$$\text{C'est-à-dire } E \approx Ha$$

I.2.1.3. Réaction d'ordre 2 :

On se souviendra que les réactions précédentes ont pu être établies aisément parce que l'on a considéré que $C_2(x)$ était constant dans le film :

$$C_2(x) \approx C_{1b} \text{ et donc } \frac{dC_2(x)}{dx} \approx 0$$

Dans ce cas il n'est pas possible d'obtenir une expression analytique pour $[N'_1]_{x=0}$. On peut toutefois obtenir une solution numérique.

Réécrivons les expressions de bilans pour les composés A_1, A_2, A_3 :

$$\mathcal{D}_1 \left[\frac{d^2 C_1(x)}{dx^2} \right] + \alpha_1 k C_{1(x)} C_{2(x)} = 0$$

$$\mathcal{D}_2 \left[\frac{d^2 C_2(x)}{dx^2} \right] + \alpha_2 k C_{1(x)} C_{2(x)} = 0$$

$$\mathcal{D}_3 \left[\frac{d^2 C_3(x)}{dx^2} \right] + \alpha_3 k C_{1(x)} C_{2(x)} = 0$$

On utilise les conditions limites suivantes pour les intégrations :

$$x = 0 \quad C_1(0) = C_1^* \quad \frac{dC_2(0)}{dx} = 0^{(3)} \quad \frac{dC_3(0)}{dx} = 0^{(3)}$$

$$x = \delta \quad C_1(\delta) = C_{1b} \quad C_2(\delta) = C_{2b} \quad C_3(\delta) = C_{3b}$$

En combinant l'équation (1) et (2) :

$$\frac{d^2 C_2(x)}{dx^2} = \frac{\alpha_2}{\alpha_1} \frac{D_1}{D_2} \frac{d^2 C_1(x)}{dx^2}$$

(3) cette condition résulte du non-transfert du composé considéré vers la phase I.

En intégrant deux fois et en utilisant *les conditions limitent*, on obtient :

$$C_2(x) = C_{2b} \left\{ 1 + \frac{\alpha_2}{\alpha_1} \frac{D_1}{D_2} \frac{C_1(x) - C_{1b}}{C_{2b}} \left[\frac{(\delta - x) \left(\frac{dC_1(x)}{dx} \right)_{x=0}}{C_1(x) - C_{1b}} + 1 \right] \right\}$$

Mais :

$$[N_1]_{x=0} = \frac{D_1}{\delta} (C_1^* - C_{1b}) \text{ (Sans réaction)}$$

$$[N_1]_{x=0} = -D_1 \left(\frac{dC_1(x)}{dx} \right)_{x=0} \text{ (Avec réaction)}$$

➡ **Facteur d'accélération chimique :**

$$E = \frac{[N_1']_{x=0}}{[N_1]_{x=0}} = - \left(\frac{dC_1(x)}{dx} \right)_{x=0} \frac{\delta}{(C_1^* - C_{1b})}$$

Et l'expression, écrite pour *les conditions de l'interface*, s'écrit :

$$C_1^* = C_{2b} \left\{ 1 + \frac{\alpha_2}{\alpha_1} \frac{D_1}{D_2} \frac{C_1^*}{C_{2b}} (1 - \mathcal{N}_3)(1 - E) \right\}$$

Soit, en introduisant le groupe :

$$\mathcal{N}_2 = \frac{\alpha_2}{\alpha_1} \frac{D_2}{D_1} \frac{C_{2b}}{C_1^*}$$

$$C_2^* = C_{2b} \left\{ 1 + \frac{(1 - \mathcal{N}_3)(1 - E)}{\mathcal{N}_2} \right\}$$

Pour pouvoir exprimer $[N_1']_{x=0}$ il faut pouvoir disposer de $\left(\frac{dC_1(x)}{dx} \right)_{x=0}$

On peut y parvenir en écrivant que *le flux interfaciale* répond à l'équation (avant) avec $C_2(x) = C_2^*$ pratiquement constant près de l'interface, car :

$$\left(\frac{dC_2(x)}{dx} \right)_{x=0} = 0$$

$$\mathcal{D}_1 \left[\frac{d^2 C_1(x)}{dx^2} \right] = -\alpha_1 k C_2^* C_{1(x)} \text{ pour } (x) \text{ voisin } 0$$

$$[N'_1]_{x=0} = k_1 \frac{\frac{\sqrt{-\alpha_1 k C_2^* \mathcal{D}_1}}{k_1}}{\operatorname{tg} \left(\frac{\sqrt{-\alpha_1 k C_2^* \mathcal{D}_1}}{k_1} \right)} \left[C_1^* - \frac{C_{1b}}{\cos \left(\frac{\sqrt{-\alpha_1 k C_2^* \mathcal{D}_1}}{k_1} \right)} \right]$$

La différence près que C_{2b} a été remplacé par C_2^* dans l'expression sous le radical.

➔ Facteur d'accélération chimique :

Le facteur d'accélération E pourra alors s'écrire, en utilisant pour C_2^* l'expression :

$$E = \frac{[N'_1]_{x=0}}{[N_1]_{x=0}} = \frac{Ha \sqrt{1 - \frac{(E-1)(1-\mathcal{N}_3)}{\mathcal{N}_2}}}{\operatorname{tg} \left[Ha \sqrt{1 - \frac{(E-1)(1-\mathcal{N}_3)}{\mathcal{N}_2}} \right]} \frac{1 - \frac{\mathcal{N}_3}{\cos \left[Ha \sqrt{1 - \frac{(E-1)(1-\mathcal{N}_3)}{\mathcal{N}_2}} \right]}}{1 - \mathcal{N}_3}$$

Le gradient de concentration de A_2 dans le film est relié au gradient de concentration de A_1 par la relation :

$$\frac{dC_2(x)}{dx} = \frac{\alpha_2 \mathcal{D}_1}{\alpha_1 \mathcal{D}_2} \left[\frac{dC_1(x)}{dx} - \left(\frac{dC_1(x)}{dx} \right)_{x=0} \right]$$

On montrerait de même que :

$$\frac{dC_3(x)}{dx} = \frac{\alpha_3 \mathcal{D}_1}{\alpha_1 \mathcal{D}_3} \left[\frac{dC_1(x)}{dx} - \left(\frac{dC_1(x)}{dx} \right)_{x=0} \right]$$

On utilise les conditions limites suivantes pour les intégrations :

$$x = \delta \quad C_1(\delta) = C_{1b} \quad C_2(\delta) = C_{2b} \quad C_3(\delta) = C_{3b}$$

Si on appelle ε_{II} la fraction du volume de réacteur occupée par la **phase II** et $\mathcal{A}$ l'aire interfaciale par unité de volume de réacteur, on peut écrire pour l'unité de volume de réacteur un bilan concernant le composé A_I franchissant la limite du film, en se référant à la condition du régime permanent, mais sans termes d'apport et d'élimination par convection :

$$\mathcal{A}[N'_1]_{x=\delta} = -\alpha_1(\varepsilon_{II} - \mathcal{A}\delta)kC_{1b}C_{2b}$$

On en tire, après développement, dans cas d'une réaction de pseudo-premier ordre :

$$\mathcal{N}_3 = \frac{\frac{1}{\cos[Ha]}}{1 + Ha \left[\left(\frac{k_{1II} \varepsilon_{II}}{\mathcal{A} \mathcal{D}_{1II}} \right) - 1 \right] \operatorname{tg}[Ha]}$$

En insérant dans cette expression les valeurs réalistes de k_{1II} , ε_{II} , $\mathcal{A}$ et $\mathcal{D}_{1II}$ (tableau), on constate que le groupe $\mathcal{B} = k_{1II} \varepsilon_{II} / \mathcal{A} \mathcal{D}_{1II}$.

Tableau : Ordres de grandeur des paramètres de transfert de masse de divers appareils.

Valeurs pratique des paramètres k_{1II} , ε_{II} , $\mathcal{A}$, $\mathcal{B}$ et $\mathcal{D}_{1II}$
$0.2 < \varepsilon_{II} < 0.99$
$5.10^{-5} < k_{1II} < 5.10^{-4} \text{ m/s}$ (pour une phase II liquide)
$10^{-9} < \mathcal{D}_{1II} < 5.10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$
$100 < \mathcal{A} < 1000 \text{ m}^2/\text{m}^3$ de réacteur
$10 < \mathcal{B} < 5000$

Conséquences sur le choix des réactions gaz-liquide :

Aires spécifiques d'interface et taux de rétention du liquide dans quelques types de réacteurs gaz-liquide			
	$\mathcal{A}$	ε_L	$\varepsilon_L / \varepsilon_L \delta$
Colonne à gouttes	60	0.05	2 à 10
Colonne à garnissage	220	0.08	10 à 100
Colonne à bulles	20	0.98	40000 à 10000
Colonne à plateaux	150	0.15	40 à 100
Cuve agitée	200	0.9	150 à 800

I.2.1.4. Réaction instantanée :

Si la réaction $\alpha_1 A_1 + \alpha_2 A_2 \rightarrow \alpha_3 A_3$ peut être considérée comme instantanée et en supposant toujours que A_1 , est transfère de la **phase I** vers la **phase II**, cette phase apportant le réactif A_2 , cela signifie que A_1 et A_2 ne peuvent pas coexister.

Dans le film s'établira une situation telle que celle décrite à la figure suivant (**Figure (4)**) :

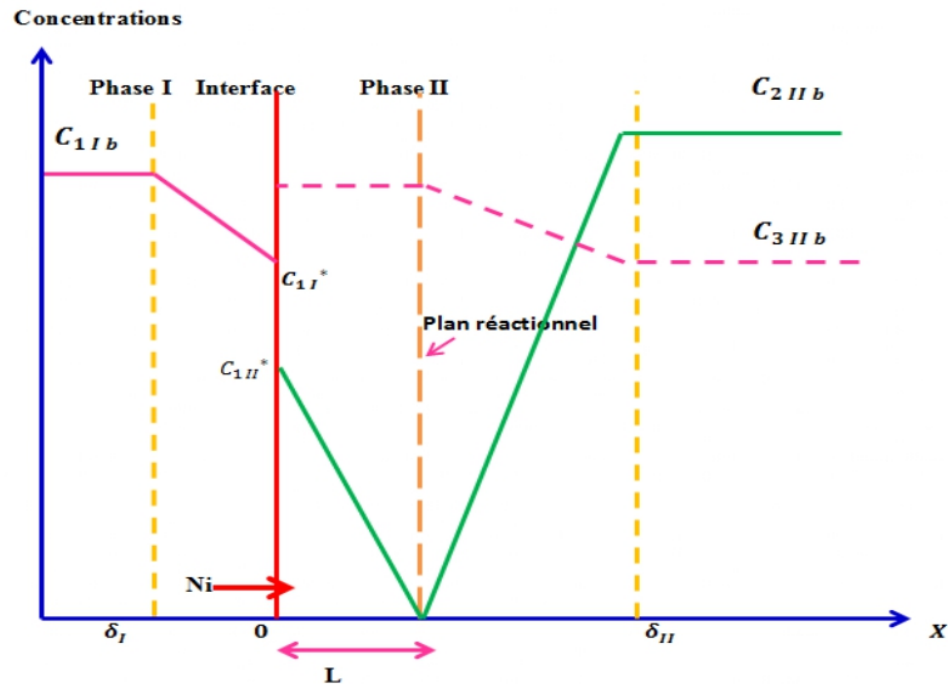


Figure (4) : profils des concentrations près de l'interface dans le cas d'une réaction instantanées irréversible.

En deca d'une distance z nous pouvons avoir présence de A_1 et de A_3 mais non de A_2 .

Au deca d'une cette distance z nous pouvons avoir présence de A_2 et A_3 mais non de A_1 .

La distance z marque l'existence d'un plan de réaction. En ce point les flux respectifs et en sens contraire des constituants A_1 et A_2 seront dans le rapport des coefficients stœchiométriques. Si tel n'était pas le cas, il subsisterait un excédent en l'un des réactifs au point z , d'où un déplacement du point z jusqu'à ce que la condition indiquée soit respectée :

$$\text{Le flux de } A_1 \text{ compté dans le sens des } x \text{ croissants} = -D_1 \left(\frac{C_1^* - 0}{0 - z} \right) = +D_1 \frac{C_1^*}{z}$$

$$\text{Le flux de } A_2 \text{ compté dans le sens des } x \text{ croissants} = -D_2 \left(\frac{C_{2b} - 0}{\delta - z} \right)$$

Le rapport de flux doit être égal au rapport des coefficients stœchiométriques (on change le signe du flux de A_2 pour tenir compte du fait que ce flux est de sens contraire au flux de A_1).

$$\frac{\frac{D_1 C_1^*}{z}}{\frac{D_2 C_{2b}}{\delta - z}} = \frac{\alpha_1}{\alpha_2}$$

Ce qui donne :

$$z = \frac{\alpha_2 D_1 C_1^* \delta}{\alpha_1 D_2 C_{2b} + \alpha_2 D_1 C_1^*}$$

En absence de réaction chimique (et pour C_{1b} pour pouvoir effectuer la comparaison) nous aurions :

$$[N_1]_{x=0} = \frac{D_1}{\delta} C_1^*$$

En présence de réaction chimique nous aurons :

$$[N'_1]_{x=0} = \frac{D_1}{z} C_1^*$$

De telle sorte que le facteur E devient égal à δ/z

$$E = \frac{\delta}{z} = 1 + \frac{\alpha_1 D_2 C_{2b}}{\alpha_2 D_1 C_1^*} = 1 + \mathcal{N}_2$$

Cette expression est, bien entendu, identique à $E_{lim} = 1 + \mathcal{N}_2$

I.2.2. Calcul du flux local de composé transféré de phase I en phase II :

Les données suivantes pu être recueillies :

$\mathcal{A}, \varepsilon_{II}, k_{1I}, k_{1II}, C_{1Ib}, C_{2IIb}, \alpha_1, \alpha_2, D_{1II}, D_{2II}$ ainsi que la relation d'équilibre :

$$C_{1Ie} = m C_{1IIe} + \rho \text{ Dans le domaine de concentration considéré.}$$

On commence par calculer Ha :

$$Ha = \frac{\sqrt{-\alpha_1 k C_{2IIb} \mathcal{D}_{1II}}}{k_{1II}}$$

On estime une première valeur de E en faisant par exemple $E_{(1)} = Ha$. On écrit :

$$[N'_1]_{x=0} = k_{1I}(C_{1Ib} - C_{1I}^*) = E_{(1)} k_{1II}(C_{1II}^* - C_{1IIb})$$

Avec :

$$C_{1I}^* = m C_{1II}^* + \rho$$

Lorsque les concentrations C_i^* tendent vers 0 il n'est plus justifié de conserver le paramètre ρ .

Ce qui donne :

$$C_{1II}^* = \frac{E_{(1)} k_{1II} C_{1IIb} + k_{1I} C_{1Ib} - \rho k_{1I}}{E_{(1)} k_{1II} + m k_{1I}}$$

On calcule alors :

$$\mathcal{N}_2 = \frac{\alpha_1}{\alpha_2} \frac{\mathcal{D}_{2II}}{\mathcal{D}_{1II}} \frac{C_{2IIb}}{C_{1II}^*}$$

I.2.3. La notion d'efficacité dans un système réactionnel a deux phases fluides (d'ordre 1) :

Dans un système réactionnel à deux phases fluides, l'efficacité est définie comme le rapport de la vitesse de transformation observée pour le réactif transféré (en mol/s.m^3 de réacteur) à la vitesse théorique que l'on pourrait si aucune limitation due au transfert physique n'intervenait.

$$\eta = \frac{r_{1app}}{r_{1max}}$$

Dans cette écriture, l'indice 1 se rapporte au composé A_1 , r_1 est la vitesse de disparition du réactif 1, comptée positivement).

Pour une réaction du premier ordre par rapport à A_1 :

$$r_{1app} = N_1 = [N'_1]_{x=0} \mathcal{A}$$

$$r_{1\max} = -\alpha_1 k C_{1II}^* \varepsilon_{II}$$

$$\text{Avec : } [N_1']_{x=0} = E k_{1II} (C_{1II}^* - C_{1IIb})$$

$$\text{On a donc : } \eta = \frac{E k_{1II} (C_{1II}^* - C_{1IIb}) \mathcal{A}}{-\alpha_1 k C_{1II}^* \varepsilon_{II}}$$

$$\text{Comme : } E = \frac{Ha}{\text{tg}[Ha]} \left[\frac{1 - \frac{\mathcal{N}_3}{\cos[Ha]}}{1 - \mathcal{N}_3} \right]$$

$$\text{Et } \mathcal{N}_3 = \frac{\frac{1}{\cos[Ha]}}{1 + Ha \text{tg}[Ha] \left[\frac{k_{1II} \varepsilon_{II}}{\mathcal{A} \mathcal{D}_{1II}} - 1 \right]}$$

On peut montrer, en appelant $\mathcal{B}$ l'expression adimensionnelle $\frac{k_{1II} \varepsilon_{II}}{\mathcal{A} \mathcal{D}_{1II}}$ que :

$$\eta = \frac{1}{Ha \mathcal{B}} \left[\frac{\text{tg}[Ha] + Ha (\mathcal{B} - 1)}{1 + Ha \text{tg}[Ha] (\mathcal{B} - 1)} \right]$$

On peut montrer également que $\eta = \frac{E(1 - \mathcal{N}_3)}{Ha^2 \mathcal{B}}$

$\frac{\mathcal{A} \mathcal{D}_{1II}}{k_{1II}} = \mathcal{A} \delta_{II}$ est le volume de film de **phase II** par unité de volume de réacteur.

ε_{II} est le volume de **phases II** par unité de volume de réacteur.

$\mathcal{B}$ est le rapport du volume de **phase II** au volume de film de **phase II**.

$\mathcal{B} - 1$ est le rapport du volume de cœur de **phase II** au volume de film de **phase II**.

I.3. Calcul d'un réacteur a deux phases fluides :

Nous allons voir maintenant comment les notions théoriques développées dans les pages précédentes peuvent être utilisées lors du calcul d'un réacteur dans lequel deux phases fluides sont présents. Nous distinguerons trois types d'appareillages :

- Le réacteur discontinu avec s variante semi-continue.
- Le réacteur parfaitement agité ou concentration uniforme.
- Le réacteur tubulaire (Le réacteur piston) ou gradient de concentration.

I.3.1. Réacteur discontinu à deux phases fluides :

Lorsque les deux phases fluides sont un gaz et un liquide, le réacteur discontinu n'est pas utilisé dans la pratique. Nous étudions ici le cas d'une réaction discontinue à deux phases liquide, rencontré plus fréquemment.

Nous examinons le cas de la réaction irréversible de deuxième ordre $\alpha_1 A_1 + \alpha_2 A_2 \xrightarrow{r} \alpha_3 A_3$ Se déroulant en **phase II** ; le réactif A_2 et le produit A_3 ne sont pas transférable en **phase I**. nous considérons un mélange parfaitement dispersé des deux phases dans le réacteur, la phase I occupant le volume V_I . La **phase II** le volume V_{II} .

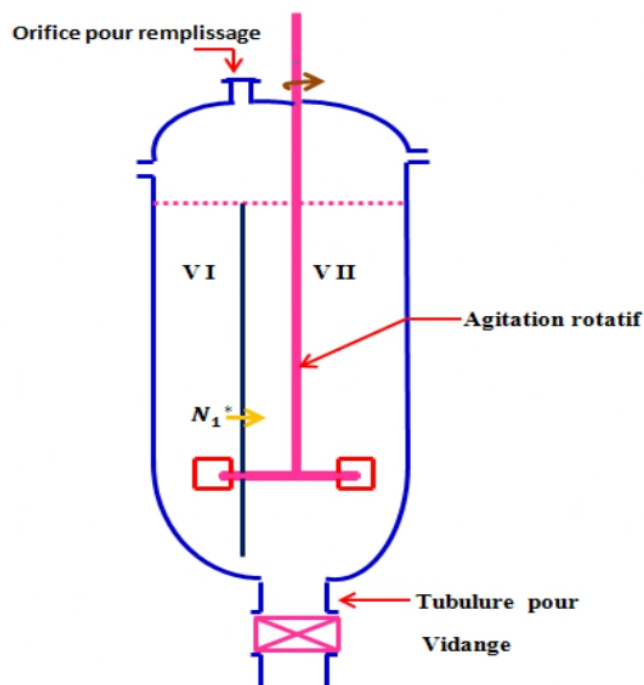


Figure (5) : Réacteur discontinu à deux phases fluides.

➡ Ecriture des bilans masquent :

Nous examinerons successivement deux cas :

➡ Cas d'une réaction lente :

Lorsque la réaction est lente, on peut considérer que les conditions de concentration qui règnent dans le film ne sont pas trop différentes de celles du cœur. On assimile donc cœur et film et on dit que les conditions sont mêmes partout dans le volume V_{II} .

Il y a lieu de noter qu'avec une réaction une réaction lente et **B** faible, la **phase II** sera constamment saturée en réactif **1** et nous serons dans les meilleures conditions pour réaliser la transformation chimique.

Avec **B** quelconque, la **phase II** sera plus ou moins saturée en réactif **1** et la concentration pourra évoluer, comme on le verra ci-après, en fonction du temps.

Les relations de bilan massique s'écrivent :

$$\frac{dn_{1I}}{dt} = -N_1 V$$

$$\frac{dn_{1II}}{dt} = +N_1 V + \alpha_1 r V_{II}$$

$$\frac{dn_{2II}}{dt} = +\alpha_2 r V_{II}$$

$$\frac{dn_{3II}}{dt} = +\alpha_3 r V_{II}$$

Avec :

$$N_1 = \mathcal{A}[N'_1]_{x=0}$$

$$V = V_I + V_{II}$$

$$V_I = \sum n_{iI} \bar{v}_{miI}$$

$$V_{II} = \sum n_{iII} \bar{v}_{miII}$$

$\bar{v}_{miI}$: Volume molaire du constituant **i** en **phase I**.

n_{iI} : Nombre de moles du constituant **i** en **phase I**.

$$r = k C_{1IIb} C_{2IIb}$$

$$[N'_1]_{x=0} = k_{1II}(C_{1II}^* - C_{1IIb}) = k_{1I}(C_{1Ib} - C_{1I}^*)$$

$$C_{1I}^* = m C_{1II}^* + \rho$$

Nous connaissons $V_I, V_{II}, (n_{iI})_0, (n_{iII})_0, k, k_{1I}, k_{1II}, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \mathcal{A}, m, \rho$.

$$\frac{dn_{1I}}{dt} = -K_{1I} \mathcal{A} V \left[\frac{\left(\frac{n_{1I}}{V_I}\right) - \rho}{m} - \frac{n_{1I}}{V_{II}} \right]$$

Avec :

$$\frac{1}{K_{1II}} = \frac{1}{k_{1II}} + \frac{1}{mk_{1I}}$$

$$\frac{dn_{2II}}{dt} = \alpha_1 k V_{II} \left(\frac{n_{1II}}{V_{II}}\right) \left(\frac{n_{2II}}{V_{II}}\right)$$

La valeur à utiliser pour $\left(\frac{n_{1II}}{V_{II}}\right)$ à chaque pas d'intégration est obtenue à partir de l'expression :

$$\frac{dn_{1II}}{dt} = \frac{\alpha_1}{\alpha_2} \frac{dn_{2II}}{dt} - \frac{dn_{1I}}{dt}$$

Qui permet de calculer n_{1II} à chaque pas.

Les conditions initiales à utiliser sont :

$$\frac{n_{1I}}{V_I} = \left(\frac{n_{1I}}{V_I}\right)_0 = (C_{1Ib})_0$$

$$\frac{n_{1II}}{V_{II}} = \left(\frac{n_{1II}}{V_{II}}\right)_0 = (C_{1IIb})_0$$

$$\frac{n_{2II}}{V_{II}} = \left(\frac{n_{2II}}{V_{II}}\right)_0 = (C_{2IIb})_0$$

➡ Cas d'une réaction rapide :

Les relations de bilan massique sont modifiées :

$$\frac{dn_{1I}}{dt} = -N_1 V$$

$$\frac{dn_{1II}}{dt} = 0 \quad \text{Avec } (n_{1II}) = 0, C_{1IIb} = 0$$

$$\frac{dn_{2II}}{dt} = -\frac{\alpha_1}{\alpha_2} N_1 V$$

$$\frac{dn_{3II}}{dt} = -\frac{\alpha_3}{\alpha_2} N_1 V$$

Avec :

$$N_1 = \mathcal{A}[N'_1]_{x=0}$$

$$[N'_1]_{x=0} = k_{1II} E(C_{1II}^*) = k_{1I}(C_{1Ib} - C_{1I}^*)$$

$$C_{1I}^* = mC_{1II}^* + \rho$$

La valeur de E doit être estimée. On prend par exemple :

$$E = Ha = \frac{\sqrt{-\alpha_1 k_{1II} C_{2IIb} D_{1II}}}{k_{1II}}$$

Ce qui nous permet de déterminer :

$$C_{1II}^* = \frac{k_{1I}(C_{1Ib} - \rho)}{E k_{1II} + m k_{1I}}$$

Ce qui nous fournit une valeur corrigée de E qui nous permet de poursuivre le calcul de manière itérative jusqu'à obtention d'une valeur correcte de E et de C_{1II}^* .

I.3.2. Réacteur tubulaire à deux phases fluides :

Dans le cas des réacteurs tubulaires à deux phases fluides, on considère généralement que les deux écoulements sont du type piston. Le contact entre les deux phases pourra être réalisé de deux manières différentes : soit à contre-courant, soit à co-courant.

Nous ne considérons ici que le cas d'une réaction lente, à titre d'illustration.

➡ Fonctionnement à contre-courant :

Ce type de fonctionnement est celui qui est le plus souvent rencontré en pratique, comme dans les colonnes à garnissage par exemple.

Comme dans les cas précédents, on écrit les bilans molaires relatifs à A_1 transféré de **phase I** en **phase II** et à A_2 co-réactif présent en **phase II**. Ces bilans seront relatifs à un élément différentiel de colonne, compris entre une cote z et une cote $z+dz$, **Figure (6)**.

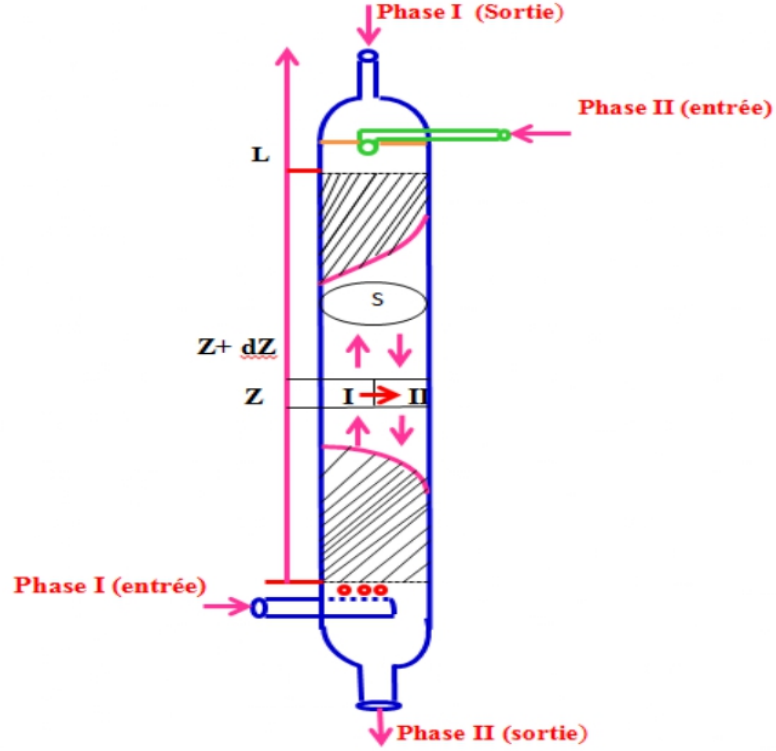


Figure (6) : réacteur tubulaire a deux phases fluides (fonctionnement à contre-courant).

En régime établi, on peut écrire :

$$(F_{1I})_z - N_1 S dz = (F_{1I})_{z+dz}$$

$$(F_{1II})_{z+dz} + N_1 S dz + \alpha_1 r \varepsilon_{II} S dz = (F_{1II})_z$$

$$(F_{2II})_{z+dz} + \alpha_2 r \varepsilon_{II} S dz = (F_{2II})_z$$

Avec : $r = kC_{1IIb}C_{2IIb}$ application à l'ensemble de la **phase II** (cœur + film).

Sous forme différentielle, ces expressions deviennent :

$$\frac{dF_{1I}}{dz} + N_1 S = 0$$

$$\frac{dF_{1II}}{dz} + N_1 S + \alpha_1 r \varepsilon_{II} S = 0$$

$$\frac{dF_{2II}}{dz} + \alpha_2 r \varepsilon_{II} S = 0$$

Dans ce cas on fait des hypothèses sur les valeurs de sortie à déterminer, on réalise l'ensemble du calcul avec ces valeurs hypothétiques et on compare les valeurs calculées aux valeurs de départ ; un calcul itératif permet de converger ces valeurs.

➡ Fonctionnement à co-courant :

Pour des raisons de commodité, nous avons coté le réacteur à partir de l'entrée de la **phase I**, c'est-à-dire du sommet du réacteur. Les équations de bilan s'écrivent, **Figure (7)** :

$$\frac{dF_{1I}}{dz} + N_1 S = 0$$

$$\frac{dF_{iII}}{dz} - N_1 S - \alpha_1 r \varepsilon_{II} S = 0$$

$$\frac{dF_{2II}}{dz} - \alpha_2 r \varepsilon_{II} S = 0$$

Les équations ne diffèrent des équations avant que par les signes de $\frac{dF_{1II}}{dz}$ et $\frac{dF_{2II}}{dz}$.

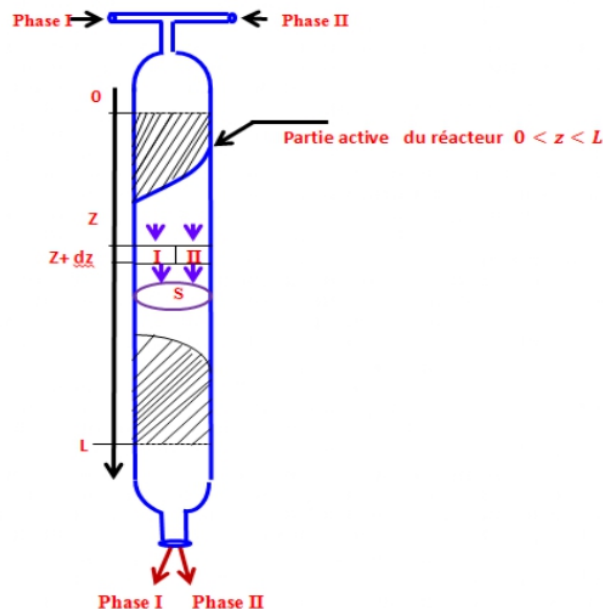


Figure (7) : Réacteur tubulaire a deux phases fluides (fonctionnement à co-courant).

I.3.3. Réacteur parfaitement agité à deux phases fluides :

Examinons à nouveau le cas d'une réaction $\alpha_1 A_1 + \alpha_2 A_2 + \alpha_3 A_3 = 0$, répondant à une cinétique d'ordre 2. Le composé A_1 est transféré de phase I en **phase II**, le composé qu'en **phase II** qui est la phase réactionnelle :

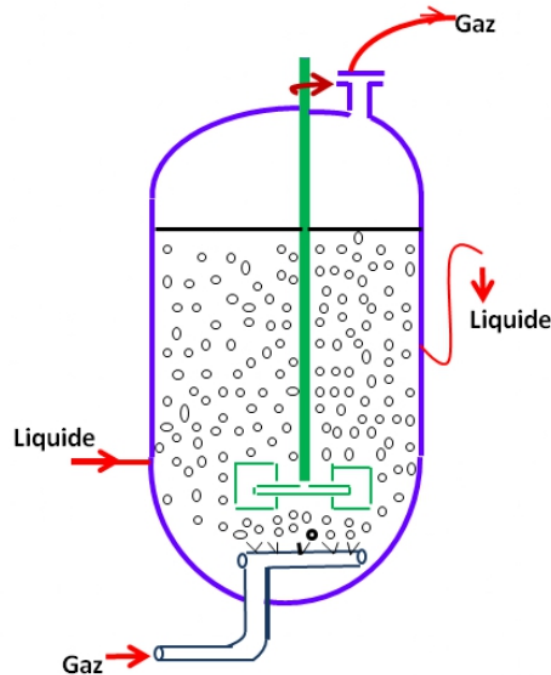


Figure (8) : Réacteur parfaitement agité a deux phases fluides

- ➔ Cas d'une réaction suffisamment lente pour que l'on puisse considérer que l'expression de vitesse $r = kC_{1IIb}C_{2IIb}$ s'applique à l'ensemble de la **phase II** contenue dans le réacteur :

$$(F_{1I})_e - N_1 V = (F_{1I})_s$$

$$(F_{1II})_e + N_1 V + \alpha_1 r \varepsilon_{II} V = (F_{1II})_s$$

$$(F_{2II})_e + \alpha_2 r \varepsilon_{II} V = (F_{2II})_s$$

Avec :

$$N_1 = \mathcal{A} [N'_1]_{x=0} = k_{1II}(C_{1II}^* - C_{1IIb})\mathcal{A}$$

- ➔ Cas d'une réaction suffisamment rapide pour que l'on puisse considérer que la **phase II** ne contienne pas de réaction A_1 :

$$(F_{1I})_e - N_1 V = (F_{1I})_s$$
$$[(F_{2II})_e - (F_{2II})_s] = \frac{\alpha_1}{\alpha_2} [(F_{2I})_e - (F_{2I})_s]$$

Avec :

$$N_1 = \mathcal{A} [N'_1]_{x=0} = k_{1II} E C_{1II}^* \mathcal{A}$$

A partir de ces expressions, on calcule le réacteur par des procédures itératives semblables à celles déjà présentées.

Chapitre II

Réacteurs fluide-solide catalytique

II.1. Diffusion intra particulaire :

Nous avons indiqué que les réactions mettant en jeu un catalyseur solide formaient une classe importante justifiant une analyse cinétique séparée. La vitesse de la réaction catalyseur hétérogène s'exprime en nombre de moles par unité de temps et par unité de surface catalytique.

On passe facilement k_S à k_M au moyen de la relation :

$$k_S S_p = k_M$$

k_S : La constant de vitesse qui lui est associée.

k_M : La constant de vitesse.

S_p : L'aire de surface par unité de masse de catalyseur.

La phase fluide (liquide ou gaz) doit entrer en contact avec la phase solide qui constitue le catalyseur. On distingue trois types principaux de réacteurs catalytiques : à lit fixe, à lit mobile et à lit fluidisé.

➡ Réacteurs à lit fixe

Si les grains de catalyseur entassés les uns sur les autres forment un empilement, dans les interstices duquel circulent le ou les fluides réactionnels.

➡ Réacteurs à lit mobile

Si l'empilement réalisé est soumis à une translation généralement verticale, l'ensemble du lit se déplaçant sous l'influence de la force de pesanteur.

➡ Réacteurs à lit fluidisé

Dans lequel les grains de catalyseur, se présentant sous forme fines particules, sont maintenus en suspension agitée par un courant ascendant de fluide réactionnel.

II.1.1. Le grain solide :

Le grain de catalyseur est d'abord caractérisé par sa forme et ses dimensions.

Dans le cas de catalyseurs se présentant sous forme de billes sphériques identiques, le diamètre de ces billes constituera bien entendu la dimension caractéristique.

Lorsque les particules ne sont pas toutes de même dimension, qu'elles soient sphériques ou non, on définit un diamètre moyen $\bar{d}_1$.

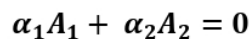
$$\bar{d}_1 = \frac{6(\text{volume total des particules d'un échantillon moyen})}{(\text{surface extérieure totale des particules d'un échantillon moyen})}$$

II.1.2. Influence de la diffusion interne sur la réaction :

➡ Etablir le bilan massique :

La figure représente une couronne dans le grain, couronne sur laquelle nous allons effectuer un bilan massique.

Soit un grain de catalyseur de rayon R , plongé dans un fluide contenant un réactif A_1 qui, au contact du catalyseur, donne lieu à la réaction dont l'équation stœchiométrique s'écrit :



Nous considérons une expression de vitesse de la forme $r' = k_M C_1$, c'est-à-dire une réaction d'ordre 1, r' étant exprimé en mol/s.kg de catalyseur. (Dans ces conditions, la constante de vitesse k_M s'exprimera en $\text{m}^3/\text{s.kg}$)

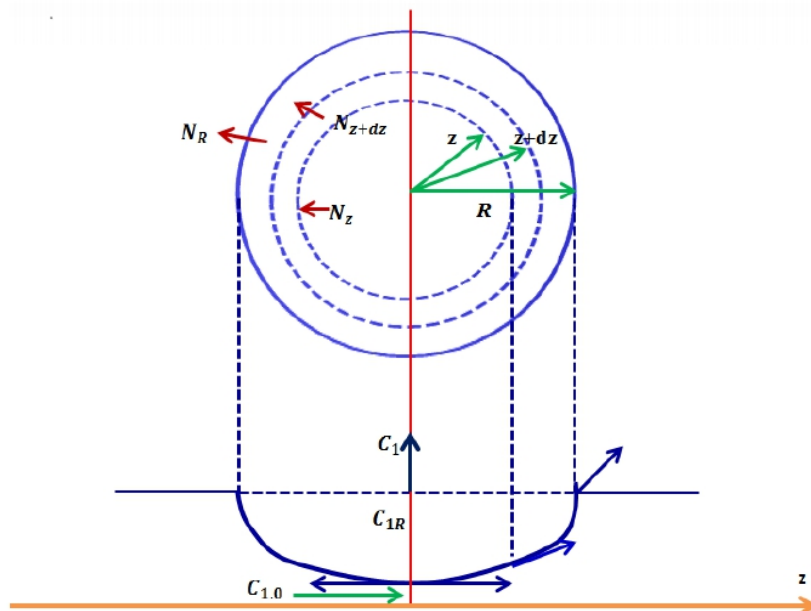


Figure (1) : Représentation des flux de diffusion dans une couronne découpée dans un grain de catalyseur sphérique et profil-type de concentration à l'intérieur du grain.

Moyennant l'introduction d'un coefficient de diffusion efficace $\mathcal{D}_{1e}$, on pourra utiliser une expression similaire à la *loi de Fick* pour effectuer un bilan molaire autour de la couronne sphérique d'épaisseur dz .

Nous écrirons que ce qui entre au rayon z plus ce qui apparaît dans la couronne est égal à ce qui sort de la couronne au rayon $z + dz$, ceci régime stationnaire établi.

Pour le réactif A_1 il entre au rayon z par unité de temps :

$$-4\pi z^2 \mathcal{D}_{1e} \left(\frac{dC_{1z}}{dz} \right)_z$$

Il apparaît dans la couronne :

$$+ \alpha_1 4\pi z^2 \mathcal{D}_{1e} dz \rho_p r'$$

(comme α_1 est négatif, c'est en réalité une disparition) et il sort au rayon $z + dz$

$$-4\pi (z + dz)^2 \mathcal{D}_{1e} \left(\frac{dC_{1z}}{dz} \right)_{z+dz}$$

Le bilan s'écrit, après développement et simplification :

$$\frac{d^2 C_{1z}}{dz^2} + \frac{2}{z} \frac{dC_{1z}}{dz} + \frac{\alpha_1 \rho_p r'_M}{\mathcal{D}_{1e}} = 0 \quad \text{avec } r'_M = k_M C_{1z}$$

Cette équation différentielle est à résoudre avec les conditions limites suivantes :

$$z = R \quad C_{1z} = C_{1R}$$

C_{1R} est concentration en A_1 qui régné à la surface extérieure du grain.

$$z=0 \quad \frac{dC_{1z}}{dz} = 0 \quad (\text{par raison de symétrie})$$

Moyennant le changement de variable $y = z C_{1z}$, on peut écrire :

$$\frac{d^2 y}{dz^2} = - \frac{\alpha_1 \rho_p k_M}{\mathcal{D}_{1e}} y = \frac{\Phi^2}{R^2} y$$

Avec :

$$\Phi = R \sqrt{\frac{-\alpha_1 \rho_p k_M}{\mathcal{D}_{1e}}}$$

La solution générale d'équation avant s'écrit :

$$y = B_1 e^{\left(\Phi \frac{z}{R}\right)} + B_2 e^{\left(-\Phi \frac{z}{R}\right)}$$

Les conditions aux limites s'expriment alors comme suit :

$$\text{Pour } z = 0 \quad y = 0 \quad \text{d'où } B_1 = -B_2$$

$$\text{Pour } z = R \quad y = RC_{1R}$$

On aura donc :

$$y = 2 B_1 \sinh \left[\Phi \frac{z}{R} \right]$$

Et :

$$B_1 = \frac{RC_{1R}}{2 \sinh [\Phi]}$$

Φ est un nombre sans dimensions appelé *module de Thiele*.

Il peut également s'exprimer par :

$$\Phi = R \sqrt{\frac{-\alpha_1 \rho_p S_p k_S}{\mathcal{D}_{1e}}}$$

Il joue, comme nous le verrons, le même rôle que *le nombre de Hatta* pour les réactions gaz-liquide.

La solution de l'équation s'écrit finalement :

$$C_{1z} = \frac{C_{1R} \sinh \left[\Phi \frac{z}{R} \right]}{\frac{z}{R} \sinh [\Phi]}$$

Si on développe en série $\sinh \left[\frac{z}{R} \right]$ au voisinage de $z = 0$, on obtient :

$$\sinh \left[\Phi \frac{z}{R} \right] \approx \Phi \frac{z}{R}$$

Et par conséquent :

$$C_{1,0} \approx C_{1R} \frac{\Phi}{\sin[\Phi]}$$

En dérivant ,on obtient :

$$\frac{dC_{1z}}{dz} = \frac{RC_{1R}}{\sin[\Phi]} \frac{\Phi \frac{z}{R} \cos\left[\Phi \frac{z}{R}\right] - \sin\left[\Phi \frac{z}{R}\right]}{z^2}$$

➡ Le flux entrant :

✂ Avec limitation diffusionnelles

Le nombre net de moles de A_1 qui pénètrent par diffusion a l'intérieur de la particule pour y réagir s'exprime par :

$$\mathcal{N}_{1R} = -4\pi R^2 \mathcal{D}_{1e} \left(\frac{dC_{1z}}{dz} \right)_{z=R} \quad (1)$$

$$-\mathcal{N}_{1R} = 4\pi R \mathcal{D}_{1e} C_{1R} \Phi \left[\frac{1}{\operatorname{tg}[\Phi]} - \frac{1}{\Phi} \right]$$

✂ Sans limitation diffusionnelles

Si la diffusion du réactif A_1 était suffisamment rapide pour que, en tout endroit de la particule, il régle la concentration C_{1R} , on aurait un flux entrant égal a la vitesse de la réaction rapportée au grain.

$$-\mathcal{N}_{1R} \text{ (sans limitation diffusionnelle)} = -\alpha_1 \frac{4}{3} 4\pi R^3 \rho_p k_M C_{1R}$$

✂ L'efficacité

On peut alors, comme dans le cas des réactions fluide-fluide définir une efficacité η

$$\eta = \frac{\mathcal{N}_{1R} \text{ (avec limitation diffusionnelle)}}{\mathcal{N}_{1R} \text{ (sans limitation diffusionnelle)}} = \frac{3}{\Phi} \left[\frac{1}{\operatorname{tg}[\Phi]} - \frac{1}{\Phi} \right]$$

✂ La relation entre l'efficacité et le module de Thiele

La réaction d'ordre 1 pour des grains sphérique, le flux de A_1 , et donc la vitesse de transformation de A_1 , par grain, s'écrit :

$$-\mathcal{N}_{1R} = -\alpha_1 \frac{4}{3} 4\pi R^3 \rho_p k_M C_{1R} \eta$$

Les notations $\mathcal{N}_1$ se rapporte au flux molaire de A_1 par unité d'aire d'interface ; la notation $\mathcal{N}_1$ se rapporte au flux molaire de A_1 par grain.

Formes géométriques autres que la sphère :

Pour des particules constituées par des cylindres longs ou plaques longes, il est possible de conduire des calculs analoges à celui présenté pour le cas des sphères.

En réalité, il apparaît préférable de s'en tenir à la notion de diamètre équivalent et d'utiliser un module de Thiele défini comme :

$$\Phi = \frac{\bar{d}_1}{2} \sqrt{\frac{-\alpha_1 \rho_p k_M}{\mathcal{D}_{1e}}} = 3 \frac{\varepsilon_p}{\mathcal{A}_s} \sqrt{\frac{-\alpha_1 \rho_p k_M}{\mathcal{D}_{1e}}}$$

S'exprime par :

$$\Phi' = L \sqrt{\frac{-\alpha_1 \rho_p k_M}{\mathcal{D}_{1e}}}$$

L étant l'épaisseur de la plaque poreuse catalytique, les autres dimensions de la plaque étant très grandes par rapport à cette épaisseur, et la transfert étant supposé se réaliser par une seule face de la plaque.

Rappelons que dans ce module de Thiele on trouve :

α_1 : Coefficient stœchiométrique du réactif transféré A_1 ;

L : Longueur caractéristique, égale à l'épaisseur de la plaque poreuse (m).

$\mathcal{D}_{1e}$: Coefficient de diffusion efficace du constituant A_1 (m^2/s).

$k_M \rho_p$: produit d'une constante de vitesse k_M ($m^3/kg.s$), par une masse volumique de plaque poreuse ρ_p (kg/m^3), soit un ensemble dont la dimension est s^{-1} .

De plus il est toujours possible de définir :

$$\mathcal{A}_s = \frac{6\varepsilon_p}{d_1}$$

En prenant la définition de $\bar{d}_1 = \frac{6\Sigma V}{\Sigma S} = \frac{6\mathcal{A}_s L}{\mathcal{A}_s} = 6L$

Ceci conduit d'ailleurs à $\varepsilon_p = \mathcal{A}_s L$; ε_p étant la fraction de volume du réacteur occupée par les grains.

II.1.3. Influence de la diffusion externe sur la réaction :

Il peut arriver, pour des réactions catalytiques rapides, que l'on soit limité par la diffusion des réactifs vers les grains de catalyseur. On dit alors que l'on a affaire à une limitation diffusionnelle externe au grain.

En appelant C_{1b} la concentration au sein de la phase fluide nourricière et C_{1s} la concentration du réactif en surface extérieure du grain, on peut écrire un bilan massique relatif au réactif A_1 par unité de volume du réacteur. Ce bilan, en régime stationnaires, s'écrit :

$$\mathcal{N}_1 = \mathcal{A}_s k_{1s}(C_{1b} - C_{1s}) = -\alpha_1 \rho_c r'_M \eta$$

Avec la vitesse de réaction r'_M exprimée en condition de surface ($C_1 = C_{1s}$) en mol/s.kg de catalyseur.

Pour une réaction d'ordre 1 :

$$r'_M = k_M C_{1s}$$

On tire une expression pour C_{1s} :

$$C_{1s} = \frac{C_{1b}}{1 - \frac{\alpha_1 \rho_c k_M \eta}{\mathcal{A}_s k_{1s}}}$$

Si on définit un coefficient de transfert global K_1 par l'expression :

$$\mathcal{N}_1 = \mathcal{A}_s k_1 (C_{1b})$$

On en tire que :

$$\frac{1}{K_1} = \frac{1}{k_{1s}} + \frac{\mathcal{A}_s}{-\alpha_1 \rho_c k_M \eta}$$

K_1 est un coefficient global de transfert tenant compte à la fois du transfert de masse externe (par k_{1s}) de la diffusion dans les pores (par η) et de la réaction chimique (par k_M).

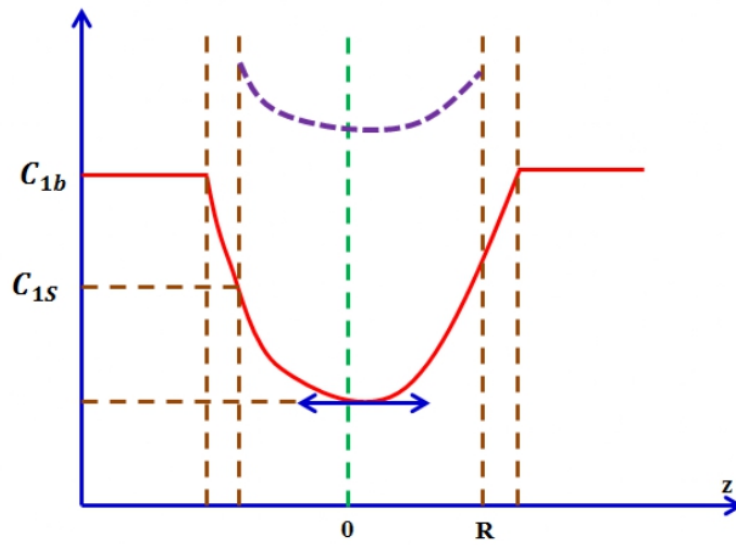


Figure (2) : profil de concentration autour et dans un grain de catalyseur en activité.

➡ Cas particulier

Le catalyseur est constitué par des grains sphériques de diamètre d_p :

$$\bar{d}_1 = d_p = \frac{6\varepsilon_p}{\mathcal{A}_s} = \frac{6\rho_s}{\mathcal{A}_s\rho_p}$$

Dans ce cas :

$$\frac{1}{K_1} = \frac{1}{k_{1s}} + \frac{6}{-\alpha_1 d_p \rho_p k_M \eta}$$

II.2. Les réacteurs mettant en jeu une phase fluide et une phase solide catalytique lit fixe et lit fluidisé :

II.2. 1. Réacteur a catalytique lit fixe :

➔ Ecriture des bilans massique

Nous traiterons le cas simple d'une réaction d'ordre 1 , on examine une situation stationnaire telle que représentée dans la figure.

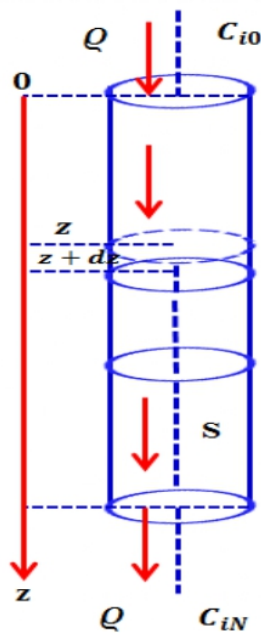


Figure (9) : Réacteur catalytique a lit fixe. Bilan-matière sur une tranche d'épaisseur dz .

On considéré dans un premier temps que l'écoulement est du type piston, ce qui permet d'écrire, pour un élément de volume de réacteur $dV = S dz$, un bilan-matière pour un composé A_i .

$$(F_i)_z - (F_i)_{z+dz} - K_i \mathcal{A}_s c_{iz} S dz = 0$$

$$(\varphi C_i)_z - (\varphi C_i)_{z+dz} - K_i \mathcal{A}_s c_{iz} S dz = 0$$

Expression dans laquelle :

φ : Débit volumétrique de fluide (supposé ici tout au long du lit) ;

C_{iz} : Concentration en composé A_i dans le fluide à la cote z ;

$\mathcal{A}_s$: Aire de surface externe des grains par unité de volume de lit.

S : Aire de la section droite de passage du fluide ;

z : Longueur du lit mesurée depuis l'entrée du réacteur ;

K_i : Constante apparente de vitesse de disparition du composé A_i

Note :

Le bilan matière réactif a une A_1 peut s'exprimer de deux façons :

✂ En utilisant la constante apparente de vitesse K_1 :

$$(\varphi C_i)_z - \varphi \left(C_{1z} + \frac{dC_{1z}}{dz} dz \right) - K_1 \mathcal{A}_s C_{1z} S dz = 0$$

✂ En utilisant le terme d'efficacité globale η :

$$(\varphi C_i)_z - \varphi \left(C_{1z} + \frac{dC_{1z}}{dz} dz \right) + \alpha_1 \rho_c k_M \eta C_{1z} S dz = 0$$

Bien entendu, équivalent. En effet :

$$\eta = \frac{K_1 \mathcal{A}_s}{-\alpha_1 \rho_c k_M}$$

En remplaçant η , on trouve bien :

$$-\alpha_1 \rho_c k_M \eta = \frac{\alpha_1 k_M \rho_c \mathcal{A}_s K_1}{-\alpha_1 \rho_c k_M} = -\mathcal{A}_s K_1$$

Sachant que :

$$\mathcal{A}_s = \frac{6\varepsilon_p}{d_p} = \frac{6\rho_c}{d_p p_p}$$

Parvenir a déterminé soit le volume du lit nécessaire pour réaliser un taux de conversion désiré, soit la conversion obtenu pour un réacteur de volume donné. Et ceci intégration numérique :

Les équations différentielles applicables dans ce cas s'écrivent, en ce concerne la masse :

$$\varphi_V C_{iV} - \varphi_{V+dV} \left(C_{1V} + \frac{dC_{iV}}{dV} dV \right) + \alpha_i \rho_s r'_M \eta dV = 0$$

Si φ_V peut être considéré comme constant et égal a φ :

$$\varphi \frac{dC_i}{dV} = -\alpha_i \rho_c r'_M \mathfrak{y}$$

r'_M est exprimé en fonction des concentrations au sein du fluide.

II.2. 2. Réacteur a catalytique lit fluidisé :

➡ Réacteurs fluidisés liquide-solide :

Il a été déjà que la fluidisation liquide-solide est normalement du type particulaire le lit de solides en suspension est donc pseudo-homogène et les recirculations aussi bien du liquide que de solide que du solide sont suffisamment intenses pour que le réacteur présente globalement un comportement proche de celui des réacteurs parfaitement agité.

➡ Réacteurs fluidisés gaz-solide :

Les hypothèses qui sous-tendent le modèle de Werther sont indiquées ci-dessous :

✂ Bilans concernant le film :

$$\mathcal{D}_{1e} \left(\frac{d^2 C_{1e}(y)}{dy^2} \right) + \alpha_1 k C_{1e}(y) = 0$$

$$-\mathcal{D}_{1e} \mathcal{A}_{Be} \left[\frac{dC_{1e}(y)}{dy} \right]_{y=\delta} + \alpha_1 k [(1 - \varepsilon_B) - \mathcal{A}_{Be} \delta] C_{1eb} = 0$$

Conditions aux limites :

$$y = 0 \quad C_{1e}^* = C_{1B} \text{ (Pas de discontinuité à l'interface)}$$

$$y = \delta \quad C_{1e}(\delta) = C_{1eb}$$

✂ Bilan concernant une tranche de réaction :

$$-V S \frac{dC_{1B}}{dh} = -\mathcal{D}_{1e} \mathcal{A}_{Be} \left[\frac{dC_{1e}(y)}{dy} \right]_{y=0} \mathcal{A}_{Be} S$$

Condition limite pour $h = 0$:

$C_{1B} = C_{1,0}$ = Concentration dans le gaz à l'entrée du réacteur :

Si l'on considère que la phase bulles se déplace en écoulement piston, on peut écrire un bilan-matière pour une tranche de lit d'épaisseur dh :

$$\varphi_B dC_{1Bb} + \alpha_1 \eta k \varepsilon_e C_{1Bb} S dh = 0$$

h : Hauteur du lit à partir du diffuseur de gaz ;

C_{1Bb} : Concentration en réactif A_1 dans la phase bulle ;

φ_B : Débit volumétrique de phase bulles

S : Aire de section de droite du lit.

Avec :

τ : Temps de séjour = $\frac{\varepsilon_e V}{\varphi_B}$

V : volume du lit = SH

Les principales difficultés résident bien évidemment dans l'estimation de η et de k .

$$k = \varepsilon_{pm} \rho_p k_M$$

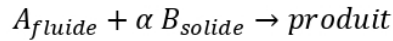
Ou k_M est la constante de vitesse rapportée à l'unité de masse de catalyseur, parfois plus aisée à obtenir que k .

Chapitre III

Réacteurs fluide- solide non catalytique

Dans ce chapitre, nous nous pencherons sur la réaction impliquant un fluide gaz-liquide et un solide qui se transforme pour produire des solides, des liquides ou des gaz.

Admettons que la réaction soit soumise à une stoechiométrie :



III.1. Classification : Les réactions polyphasiques fluide-solide non catalytiques sont classées en :

- ✓ Réaction où la taille du solide reste constante tout au long de la réaction.
- ✓ Réaction où la taille du solide change et fluctue.

III.1.1. La taille du solide est invariable :

- Les produits de la réaction se présentent tous sous forme solide.
- Le sol de départ est contaminé par des impuretés.
- On compare la densité des produits solides à celle du solide initial.

III.1.2. La taille de solide est variable :

- Les produits de la réaction se trouvent tous sous forme fluide.
- Il n'y a aucune impureté dans le solvant de départ.
- La densité des produits diffère de celle du solvant initial ($\omega_{produit} > \omega_{solide}$)

III.1.3. Modèle de réaction:

Dans le cas des réactions non catalytiques impliquant des particules solides immergées dans un fluide, il est possible de considérer deux modèles idéaux :

- Modèle dit ‘‘à conversion progressive’’
- Modèle dit ‘‘à cœur rétrécissant’’ (*shrinkingcore model*)

III.1.4. Modèle à cœur rétrécissant :

S'appuyant sur une représentation différente du processus, la réaction n'est plus volumique, mais plutôt surfacique. En d'autres termes, elle commence d'abord à la surface de la particule, puis

le front de réaction (zone de réaction) se déplace vers l'intérieur de la particule, laissant derrière elle une partie des produits solides ayant une densité apparente similaire à celle du solide initial.

À chaque instant, il existe du réactif solide non réagi, appelé "cœur," dont la taille diminue (voir annexe).

III.1.5. Modèle à cœur rétrécissant pour des particules sphérique de taille fixe :

Le modèle initialement développé par Yagi et Kanii (1955-1961) considère cinq étapes successives qui se déroulent au cœur de la réaction (voir annexes) :

- ➞ La diffusion du réactif **A** à travers la pellicule enveloppant la particule, où le régime d'écoulement est laminaire.
- ➞ La pénétration et la diffusion de **A** à travers la couche centrale vers la surface du cœur de la particule qui contient le réactif **B**.
- ➞ La réaction des réactifs **A** et **B** à la surface du cœur de la particule.
- ➞ La diffusion des produits de réaction fluides à travers la couche de cendres vers la surface externe de la particule.
- ➞ La diffusion des produits de réaction fluides à travers le film qui enveloppe la particule et les amène vers la solution.

Chacune de ces étapes a sa propre vitesse, et c'est la plus lente qui limite la cinétique globale de la réaction. Il est possible que certaines de ces étapes ne se produisent pas, en particulier les étapes 2 et 4 si aucun produit de réaction n'est solide, ou les étapes 4 et 5 si aucun produit de réaction n'est fluide.

III.2. Contrôle cinétique par la diffusion de A dans film fluide (régime externe) :

La figure représente la situation où la résistance au transfert du A dans le film exerce le contrôle cinétique sur la réaction globale. Les flux de disparition de A sont exprimés selon la réaction :

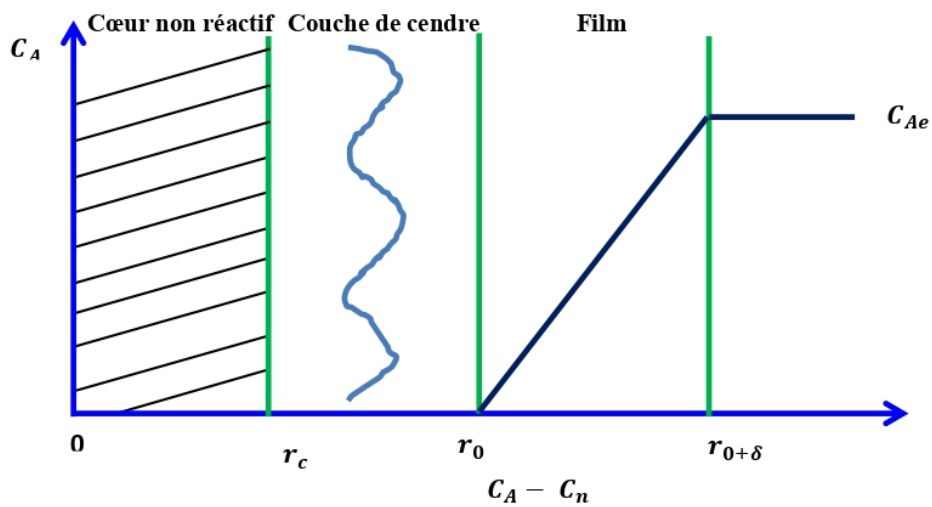


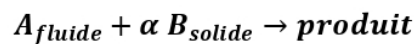
Figure (1) : La figure représente la situation où la résistance au transfert du A.

$$N_{A/r_0} = \frac{-1}{S/r_0=r} \frac{dn_A}{dt}$$

$$-\frac{dn_A}{dt} = N_{A/r_0} S/r_0=r$$

$$-\frac{dn_A}{dt} = k_D (C_{Ae} - C_{As}) 4\pi r_0^2$$

k_D : Coefficient diffusion



$$\begin{cases} r_A = \alpha_A r = -r \\ r_B = -\alpha r = \alpha (-r) = \alpha r_A \end{cases}$$

$$\Rightarrow \frac{-1}{S} \frac{dn_B}{dt} = \alpha \frac{-1}{S} \frac{dn_A}{dt}$$

$$\Rightarrow \frac{dn_B}{dt} = \alpha \frac{dn_A}{dt}$$

X_B : est le taux de conversion de **B** en fonction du rayon :

$$X_B = 1 - \left(\frac{r_c}{r_0}\right)^3$$

$$\text{Ou : } \frac{r_c}{r_0} = (1 - X_B)^{1/3}$$

Démonstration :

$$\text{On a : } X_B = \frac{n_{B0} - n_B}{n_{B0}} = 1 - \frac{n_B}{n_{B0}}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \omega_B: \text{densité de B, (densité massique)} \quad \omega_B = \frac{m_B}{V_B} \\ \omega'_B: \text{densité de B, (densité molaire)} \quad \omega'_B = \frac{n_B}{V_B} = \frac{\omega_B}{M_B} \end{array} \right.$$

V_B : volume du cœur rétrécissant de r_c :

$$V_B = \frac{4}{3} \pi r_c^3$$

V_{B0} : volume initiale de la particule r_0 :

$$V_{B0} = \frac{4}{3} \pi r_0^3$$

$$\text{On a : } \omega'_B = \text{constant} \rightarrow \frac{n_{B0}}{V_{B0}} = \frac{n_B}{V_B} \Rightarrow \frac{n_B}{n_{B0}} = \frac{V_B}{V_{B0}} = \frac{\frac{4}{3} \pi r_c^3}{\frac{4}{3} \pi r_0^3} = \left(\frac{r_c}{r_0} \right)^3$$

D'où :

$$X_B = 1 - \left(\frac{r_c}{r_0} \right)^3$$

$$n_B = \omega'_B V_B = \frac{4}{3} \pi \omega'_B r_c^3$$

$$\frac{dn_B}{dt} = \frac{4}{3} \pi \omega'_B \frac{dr_c^3}{dt} = 4 \pi \omega'_B r_c^2 \frac{dr_c}{dt}$$

$$\frac{1}{\alpha} \frac{dn_B}{dt} = \frac{dn_A}{dt} = -\alpha k_D (C_{Ae} - C_{As}) 4 \pi r_0^2$$

$$4 \pi \omega'_B r_c^2 \frac{dr_c}{dt} = -\alpha k_D (C_{Ae} - C_{As}) 4 \pi r_0^2$$

$$\Rightarrow dt = \frac{-\omega'_B}{\alpha k_D (C_{Ae} - C_{As}) r_0^2} r_c^2 dr_c$$

$$\Rightarrow \int_0^t dt = \frac{-\omega'_B}{\alpha k_D (C_{Ae} - C_{As}) r_0^2} \int_{r_0}^{r_c} r_c^2 dr_c$$

$$\Rightarrow t = \frac{-\omega'_B}{3\alpha k_D(C_{Ae} - C_{As})r_0^2} [r_c^3 - r_0^3]$$

$$\Rightarrow t = \frac{r_0 \omega'_B}{3\alpha k_D(C_{Ae} - C_{As})} \left[1 - \left(\frac{r_c}{r_0} \right)^3 \right]$$

$$\Rightarrow t = \frac{r_0 \omega'_B}{3\alpha k_D(C_{Ae} - C_{As})} X_B$$

Cas :

$$X_B = 0 \Rightarrow r_c = 0$$

$$\Rightarrow t = \frac{r_0 \omega'_B}{3\alpha k_D(C_{Ae} - C_{As})} = t_{0\text{film}} = t_{0\text{externe}}$$

$t_{0\text{film}}$: La durée de conversion d'une particule de rayon r_0 dans le cas du régime externe équivalent au temps total de consommation.

$$t = t_{0\text{film}} X_B$$

III.2.1. Régime de diffusion interne (dans la couche de cendres) :

La figure ci-dessous illustre la situation où la réaction de transfert de A dans la couche de cendres exerce le contrôle cinétique sur la réaction globale. Le flux de dispersion de A est donné à tout instant par le flux de diffusion de A à travers la surface d'une sphère de rayon (r) en direction du cœur de la particule.

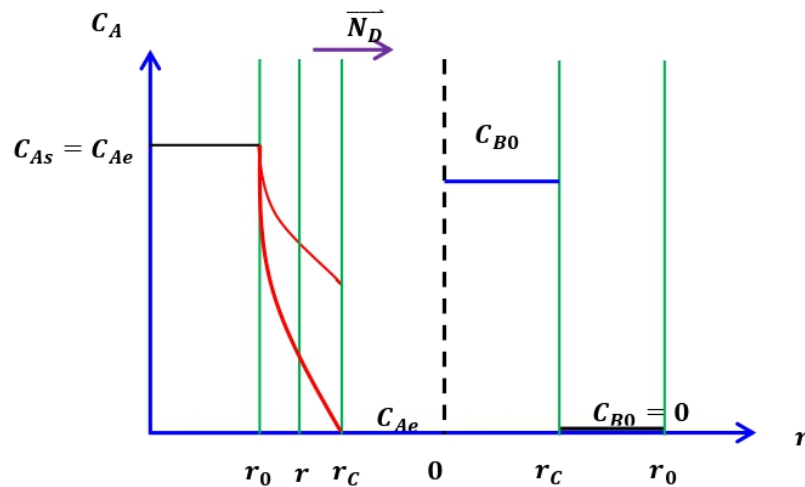


Figure (2) : La figure représente illustre la situation où la réaction de transfert de A dans la couche de cendres exerce le contrôle cinétique.

➡ Bilan massique :

$$\frac{dn_A}{dt} = N_D / r \dots \dots \dots 1$$

$$(N_D S / r_0 = N_D S / r + N_D / r_c = \text{constante})$$

$$\text{Avec : } N_D = -D_e \frac{dC_A}{dr}$$

D_e : coefficient diffusion effectif de A dans les cendres.

$$\Rightarrow \frac{dn_A}{dt} = -D_e \frac{dC_A}{dr} 4\pi r^2$$

$$\Rightarrow - \int_{C_{A_s}}^{C_{A_c}} dC_A = \frac{-1}{4\pi D_e} \frac{dn_A}{dt} \int_{r_0}^{r_c} \frac{dr}{r^2}$$

avec $\frac{dn_A}{dt} = \text{constante}$

$$\Rightarrow (C_{A_s} - C_{A_c}) = \frac{-1}{4\pi D_e} \frac{dn_A}{dt} \left(\frac{1}{r_c} - \frac{1}{r_0} \right) \dots \dots \dots 2$$

$$\text{Et } \frac{dn_B}{dt} = \alpha \frac{dn_A}{dt} = \frac{d(V_B \omega'_B)}{dt} = 4\pi \omega'_B r_c^2 \frac{dr_c}{dt}$$

$$(2) \Rightarrow 4\pi D_e (C_{A_s} - C_{A_c}) = \frac{-4\pi \omega'_B r_c^2}{\alpha} \left(\frac{1}{r_c} - \frac{1}{r_0} \right) \frac{dr_c}{dt}$$

$$\Rightarrow \int_0^t dt = \frac{-\omega'_B}{\alpha D_e (C_{A_s} - C_{A_c})} \int_{r_0}^{r_c} \left(r_c - \frac{r_c^2}{r_0} \right) dr_c$$

$$t = \frac{-\omega'_B}{\alpha D_e (C_{A_s} - C_{A_c})} \left[\left(\frac{r_c^2}{2} - \frac{r_c^3}{3r_0} \right) / r_0 \right]$$

Lorsque : $X_B = 1$ et $(r_c = 0)$ le durée de conversion total est :

$$t_{\text{olimite}} = \frac{-\omega'_B r_0^2}{6 \alpha D_e (C_{A_s} - C_{A_c})} \left[1 - 3 \left(\frac{r_c}{r_0} \right)^2 + 2 \left(\frac{r_c}{r_0} \right)^3 \right]$$

Et par conséquent :

$$\frac{t}{t_{0\text{limite}}} = 1 - 3\left(\frac{r_c}{r_0}\right)^2 + 2\left(\frac{r_c}{r_0}\right)^3 = 1 - 3(1 - X_B)^{2/3} + 2(1 - X_B)$$

III.2.1.1. Régime chimique :

La figure illustre les profils de concentration de A où la cinétique est contrôlée par la réaction chimique.

➡ Bilan massique :

$$\frac{dn_A}{dt} = r_A S / r_c = -k_s C_A 4\pi r_c^2$$

Et $r_A = -k_s C_A$ et $C_{Ae} = C_{Ac} = C_{As}$ (1^{er} ordre)

$$\frac{dn_B}{dt} = \alpha \frac{dn_A}{dt} = 4\pi \omega'_B r_c^2 \frac{dr_c}{dt}$$

$$\text{D'où : } 4\pi \omega'_B r_c^2 \frac{dr_c}{dt} = -\alpha k_s C_A 4\pi r_c^2$$

$$\Rightarrow \int_0^t dt = \frac{-\omega'_B}{\alpha k_s C_{Ac}} \int_{r_0}^{r_c} dr_c \Rightarrow t = \frac{-\omega'_B}{\alpha k_s C_{Ac}} (r_c - r_0)$$

$$\Rightarrow t = \frac{-\omega'_B r_0}{\alpha k_s C_{Ac}} \left(1 - \frac{r_c}{r_0}\right) = \frac{-\omega'_B r_0}{\alpha k_s C_{Ac}} (1 - (1 - X_B)^{1/3})$$

$$\text{Lorsque : } X_B = 1 \Rightarrow t = \frac{-\omega'_B r_0}{\alpha k_s C_{Ac}}$$

III.2.1.2. Régime mixte :

Lorsque toutes les résistances interviennent simultanément, et dans le cas d'une réaction de premier ordre (à la surface) :

$$t_{\text{total}} = t_{\text{régime externe}} + t_{\text{régime interne}} + t_{\text{régime chimique}}$$

$$t_{0\text{ total}} = t_{0\text{ ext}} + t_{0\text{ int}} + t_{0\text{ chim}}$$

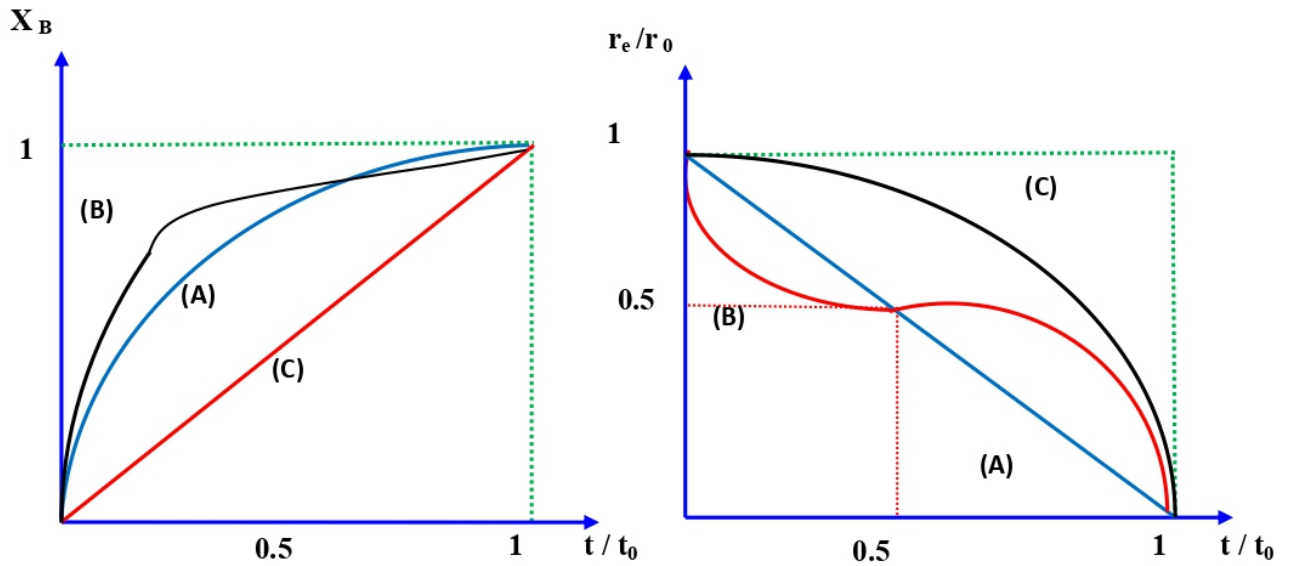


Figure (3) : La figure représente les résistances interviennent simultanément.

A : Régime chimique

B : Régime dans les couches (interne)

C : Régime externe

III.3. Taille variable :

Dans ce cas, les produits de la réaction sont éliminés de la particule au fur et à mesure de leur formation.

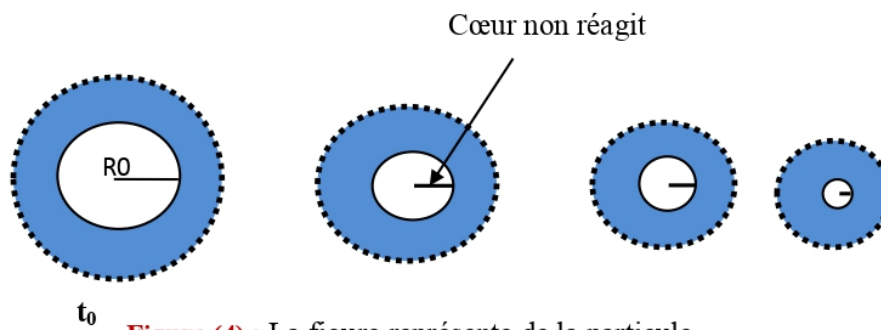


Figure (4) : La figure représente de la particule.

III.3.1. Régime chimique :

L'expression de t est similaire à celle trouvée précédemment.

$$t = t_{0\text{ ch}} (1 - (1 - X_B)^{1/3})$$

$$t_{0\text{ ch}} = \frac{\rho_B' r_0}{9 K_S C_{Ac}}$$

III.3.2. Régime dans le film (externe) :

$$\frac{dn_A}{dt} = -k_D (C_{AC} - C_{AS}) 4\pi r_c^2$$

$k_D = \text{cst}$

Dans ce cas (k_D) (coefficient de transfert est variable) $\rightarrow$ dépend du rayon de particule

➔ Relation se Ranz et Marshall

$$Sh = 2 + 0.6 Sc^{1/3} Re^{1/2}$$

$$Sh = \frac{k_D \cdot d_p}{D_A}$$

$$Sc = \frac{\mu}{\rho D_A}$$

$$Re = \frac{u d_p \rho}{\mu}$$

d_p : Diamètre équivalent de particule .

ρ : Masse volumique .

D_A : Coefficient de diffusion moléculaire .

μ : Viscosité , u : Vitesse

d'où :

$$k_D = \frac{D_A}{d_p} (2 + 0.6 Sc^{1/3} Re^{1/2})$$

On trouve deux cas :

1. Si d_p très faible (fines particules) ainsi que le débit (Re très faible)

$$k_D = \frac{2 D_A}{d_p} \text{ (Régime de stockes)}$$

2. Dans le cas (grosses particules) et débit important ($Re \gg 1$)

$$k_D = \frac{D_A}{d_p} \left(0.6 Sc^{1/3} Re^{1/2} \right) = \frac{D_A}{d_p} \left(0.6 \left(\frac{\mu}{\rho D_A} \right)^{1/3} \left(\frac{u d_p \rho}{\mu} \right)^{1/2} \right)$$

$$k_D \approx \text{cste} \times d_p^{-1/2}$$

Exercices Appliqué

L'ammoniac dans l'air est absorbé par l'eau dans ce processus stationnaire NH_3 diffuser à travers une couche d'air stagnant de **2 cm** d'épaisseur qui a traversé une couche d'eau stagnante de **1 cm** d'épaisseur les compositions de NH_3 sur les bords de la couche d'eau valent respectivement 4.5% et 0% . La température du système $T=15^\circ\text{C}$; $P_t=1\text{ atm}$.

- Déterminer le flux de l'ammoniac en négligeant la convection.

En données : $D_{\text{NH}_3\text{-eau}}=1.77 \cdot 10^{-5}\text{ cm}^2/\text{s}$; $D_{\text{NH}_3\text{-air}}=0.2\text{ cm}^2/\text{s}$. La courbe d'équilibre c'est Tableau :

$P_A \times 10^3(\text{atm})$	0.658	1.315	1.97	2.63	3.29	3.95
$C_A \times 10^{-6}(\text{mol}/\text{m}^3)$	6.1	11.9	20	32.1	53.6	84.8

Solution

$$X_{\text{NH}_3\text{-air}} = 4.5\% \quad X_{\text{NH}_3\text{-eau}} = 0\%$$

1- Détermine le flux NH_3 :

$$K_g = \frac{D_{\text{NH}_3\text{-air}}}{\delta l} = \frac{0.2}{2} = 0.1\text{ cm/s} \quad K_L = \frac{D_{\text{NH}_3\text{-eau}}}{\delta l} = \frac{1.77 \cdot 10^{-5}}{1} = 1.77 \cdot 10^{-5}\text{ cm/s}$$

$$m = \frac{K_L}{K_g} = \frac{1.77 \cdot 10^{-5}}{0.1} = -1.77 \cdot 10^{-4}$$

2- Equation

$$P_{A_i} = a C_{A_i} + b \dots \text{courbe} \quad P_{A_i} = a C_{A_i} + b' \dots (\text{MI}) \quad M = (0.045 \quad 0)$$

$$\frac{P_A - P_{A_i}}{C_A - C_{A_i}} = -\frac{K_L}{K_g} = m \Rightarrow m = -1.77 \cdot 10^{-4}$$

$$b' = P_{A_i} - C_{A_i} a = 0.045 - (-1.77 \cdot 10^{-4}) \Rightarrow b' = 0.045$$

$$M: P_{A_i} = -1.77 \cdot 10^{-4} C_{A_i} + 0.045$$

Courbe:

$$P_{A_i} = a C_{A_i} + b \Rightarrow \text{choisi point : } b=0 \quad P_{A_i} = a C_{A_i} \quad a = \frac{P_{A_i}}{C_{A_i}} \Rightarrow a = 10786.855$$

$$P_{A_i} = 10786.855 C_{A_i} \quad (\text{courbe}) \dots 1$$

$$P_{A_i} = -1.77 \cdot 10^{-4} C_{A_i} + 0.045 \quad (M) \dots 2$$

2 Remplace 1

$$P_{A_i} = -1.77 \cdot 10^{-4} \left(\frac{P_{A_i}}{10786.855} \right) + 0.045$$

$$10786.855 P_{A_i} = -1.77 \cdot 10^{-4} P_{A_i} + 0.045 \cdot 10^7$$

$$P_{A_i} (10786.855 + 1.77 \cdot 10^{-4}) = 0.045 \times 10786.8$$

$$P_{Ai} = \frac{0.045 \times 10786.855}{10786.885 + 1.77 \cdot 10^{-4}} \rightarrow P_{Ai} = 0.0449 \text{ atm}$$

$$P_{Ai} = 10786.855 C_{Ai}$$

$$C_{Ai} \frac{P_{Ai}}{10786.855} = \frac{0.0449}{10786.855}$$

$$C_{Ai} = 4.17 \cdot 10^{-6} \text{ mol/cm}$$

$$N_A = K_G (P_A - P'_A) \quad N_A = \frac{0.3}{2 \cdot 10^2 \cdot 0.082 \cdot 288} (0.045 - 0.0449)$$

$$N_A = 4.23 \cdot 10^{-10} \text{ mol/cm}^2 \cdot \text{s} \quad N_A = \frac{4.23 \cdot 10^{-10}}{10^{-4}}$$

Exercice N° 2

Soit la réaction **Cyclopentene + H₂ → cyclopentane** effectuée dans un réacteur continu parfaitement agité, destiné à traiter **360 L/h** de la solution de cyclopentene (**C_{1L}**)_e, de manière à convertir **90%** de cyclopentene

- Calcule le nombre de Hatta.
- Calcule le Facteur N_3 .
- Calcule le Facteur d'accélération.

Données : $D_1 = 5 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$ $D_2 = D_1 / 3 \text{ cm}^2/\text{s}$
 $k = 2.375 \cdot 10^5 \text{ cm}^3/\text{mol} \cdot \text{s}$ $C^*_{1L} = 4 \cdot 10^{-5} \text{ mol/cm}^3$
 $(C_{1L})_e = 10 \text{ mol/L}$ $k_1 = 3 \cdot 10^2 \text{ cm/s}$
 $A = 20 \text{ cm}^2/\text{cm}$

Solution

$$Q = 360 \text{ l/h} = \frac{360 \cdot 10^3}{3600} = 100 \text{ cm}^3/\text{s}$$

$$(C_{1L}) = 10 \text{ ml/l} = 10^{-2}$$

$$10^{-2} \rightarrow 100\%$$

$$X \rightarrow 10\% \quad X = \frac{10^{-2} \cdot 10\%}{100\%} \quad X = 10^{-3}$$

Donc :

$$Ha = \frac{\sqrt{\alpha D_1 K (C_{1L})}}{K_1} = \frac{\sqrt{2.375 \cdot 10^5 \cdot 10^{-3} \cdot 5 \cdot 10^{-5}}}{3 \cdot 10^{-2}} = 3.63$$

Facteur N_3

$$N_3 = \frac{(C_{1L})_e}{C^*_{1L}} = 0.25 \cdot 10^{-3} = 250$$

Facteur d'accélération

$$E = \frac{Ha}{\tan(Ha)} = 3.63$$

Exercice N° 3

Absorption de CO_2 dans les solutions alcalines

La réaction s'écrit : $\text{CO}_2 + 2\text{OH}^- \longrightarrow \text{CO}_3^{2-} + \text{H}_2\text{O}$ et la vitesse $r = k[\text{CO}_2][\text{OH}^-]$.

Vers 20°C , k est de l'ordre de $5.10^3 \text{ m}^3/\text{kmol} \cdot \text{s}$, $D_{\text{CO}_2} = 1,7.10^{-9} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$, $D_{\text{OH}^-} = 2,8.10^{-9} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$

On absorbe CO_2 sous 1 atmosphère (concentration à saturation $0,03 \text{ kmol} \cdot \text{m}^{-3}$) dans une solution alcaline de concentration $2 \text{ kmol} \cdot \text{m}^{-3}$, k_L de 2 à $5.10^{-4} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$

- Calculer le critère de Hatta et le facteur E.

Solution : $Ha_1 = 20.6$; $Ha_2 = 8$; $E_{\text{lm}} = 56$

Références:

1. Pylhwa, T. (1984). Les réacteurs chimiques: conception, calcul, mise en oeuvre. Paris: Technip.
2. Roustan M : Transfert gaz/liquide dans les procédés de traitement des eaux et des effluents gazeux, Tec & Doc Lavoisier, Paris (2003) ISBN : 2-7430-0605-6
3. Schweich D : génie de la réaction chimique, Tec & Doc Lavoisier (2001) ISBN : 2-7430-0459-2
4. R.Missen, C.Mims and B .Saville : Chemical reactions engineering and kinetics, John Wiley and Sons, New York (1999)
5. Levinspiel O : chemical reaction engineering, 3^{ème} édition, John Wiley and Sons, New York (1998) ISBN : 0471225424X
6. Villermaux J : Génie de la réaction chimique , conception et fonctionnement des réacteurs, 2^{ème} édition, Tec & Doc Lavoisier , Paris (1993) ISBN : 2-85206-132-5
7. Atkinson B and Mayituna F : Biochemical engineering and biotechnology hand book, Ed Mac Millan (1991) ISBN : 978-033342-4032
8. Froment G and Bischoff KB : Chemical reactor, analysis and design : John Wiley and Sons, New York (1979)

Annexes

216

CARACTÈRES GÉNÉRAUX DES RÉACTEURS A DEUX PHASES FLUIDES

7

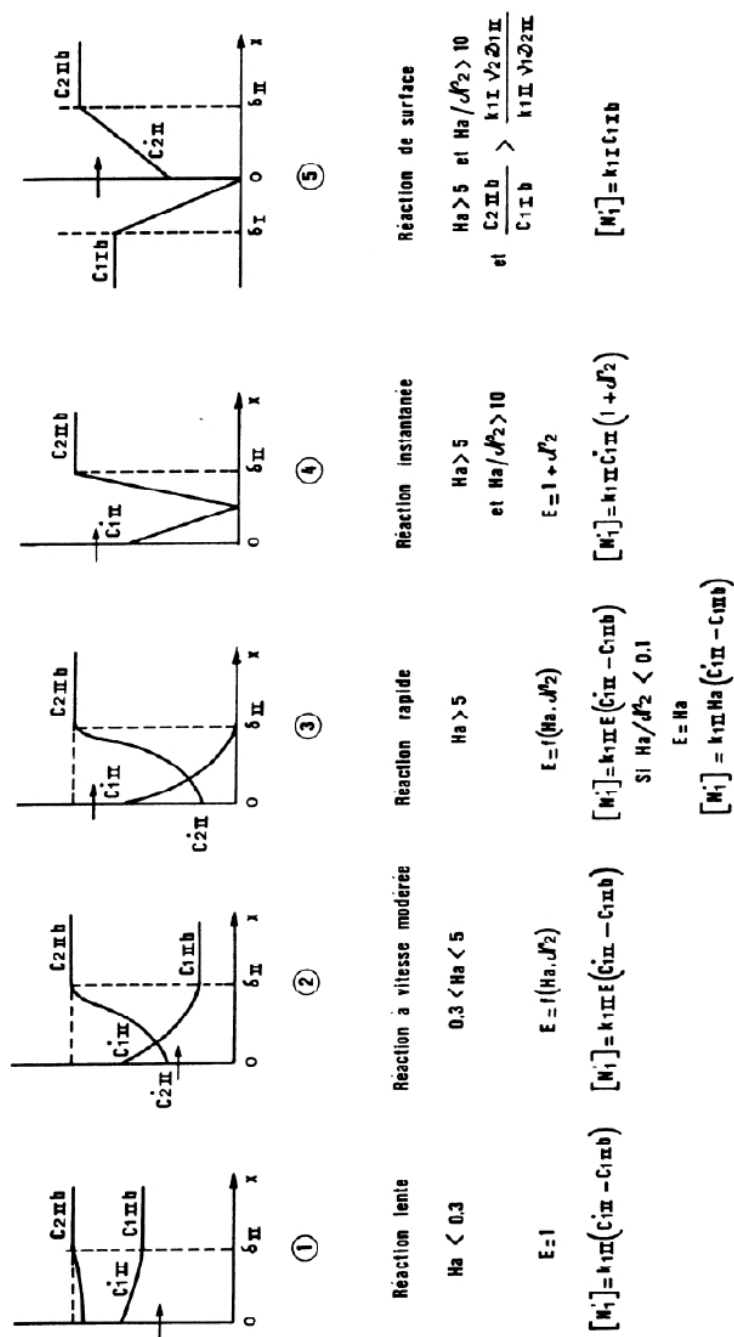


FIG. 7.8 – Divers régimes possibles pour un transfert entre deux phases accompagné d'une réaction chimique dans la phase II selon la relation stœchiométrique :



(L'interface entre les deux phases I et II est localisée à $x = 0$).

CARACTÈRES GÉNÉRAUX DES RÉACTEURS A DEUX PHASES FLUIDES

TABLEAU 7.4
EXPRESSIONS DU FACTEUR D'ACCELERATION $\bar{E}$ DANS LE CADRE DES PRINCIPALES THÉORIES DU TRANSFERT DE MASSE
 $\mathcal{N}_3 = 0$

Type de réaction	Régime et valeur de Ha	THÉORIES		
		Des deux films WHITMAN	De la pénétration HIGBIE	Du renouvellement de la surface DANCKWERTS
$v_1 A_1 \rightarrow v_2 A_2$ 1 ^{er} ordre	Réaction lente $Ha < 0,3$	$E = 1$		
	Vitesse moyenne $0,3 \leq Ha < 5$	$E = \frac{Ha}{th(Ha)}$	$E = Ha \left[1 + \frac{\pi}{8(Ha)^2} \operatorname{Erf} \left(\sqrt{\frac{2Ha}{\pi}} \right) + \frac{1}{2} \exp \left[-\frac{4}{\pi} (Ha)^2 \right] \right]$	$E = \sqrt{1 + (Ha)^2}$
	Réaction rapide $Ha \geq 5$	$E = Ha$		
$v_1 A_1 + v_2 A_2 \rightarrow v_3 A_3$ 2 ^e ordre	Réaction instantanée	$E_{lim} = 1 + \mathcal{N}_2$	$E_{lim} = \sqrt{\frac{\mathcal{D}_{11}}{\mathcal{D}_{21}}} (1 + \mathcal{N}_2)$	

DONNÉES ET CORRÉLATIONS POUR LES RÉACTEURS GAZ-LIQUIDE

TABLEAU 8.1
ORDRES DE GRANDEUR DES PARAMÈTRES DE TRANSFERT DE MASSE DE DIVERS APPAREILS [89]

	Rétention en liquide ⁽¹⁾ (%)	Rétention en gaz ⁽¹⁾ (%)	k_G (m/s)	k_L (m/s)	Aire interfaciale ⁽¹⁾ (m ⁻¹)
1) Colonnes à bulles	> 70	2-30	$1-5 \cdot 10^{-2}$	$10^{-4}-5 \cdot 10^{-4}$	100-500
2) Appareils à agitation mécanique	> 70	2-30	$1-5 \cdot 10^{-2}$	$10^{-4}-6 \cdot 10^{-4}$	200-2000
3) Colonnes à plateaux	60-80	20-40	$1-5 \cdot 10^{-2}$	$10^{-4}-5 \cdot 10^{-4}$	200-500
	10-20 ⁽²⁾	80-90 ⁽²⁾			25-100 ⁽²⁾
4) Colonnes à garnissage	5-15	50-80	$1-5 \cdot 10^{-2}$	$5 \cdot 10^{-5}-3 \cdot 10^{-4}$	50-250
5) « Scrubbers »	< 5 ⁽³⁾	> 95 ⁽³⁾	$1-5 \cdot 10^{-2}$	$10^{-4}-5 \cdot 10^{-4}$	25-200
	< 30 ⁽⁴⁾	> 70 ⁽⁴⁾			

(1) Rapportée à la somme des volumes actifs des deux phases (phase I + phase II).

(2) Rapportée au volume total de la colonne (phase I + phase II + volume occupé par les internes + volumes non actifs).

(3) « Scrubber » venturi.

(4) « Scrubber » à pulvérisation.

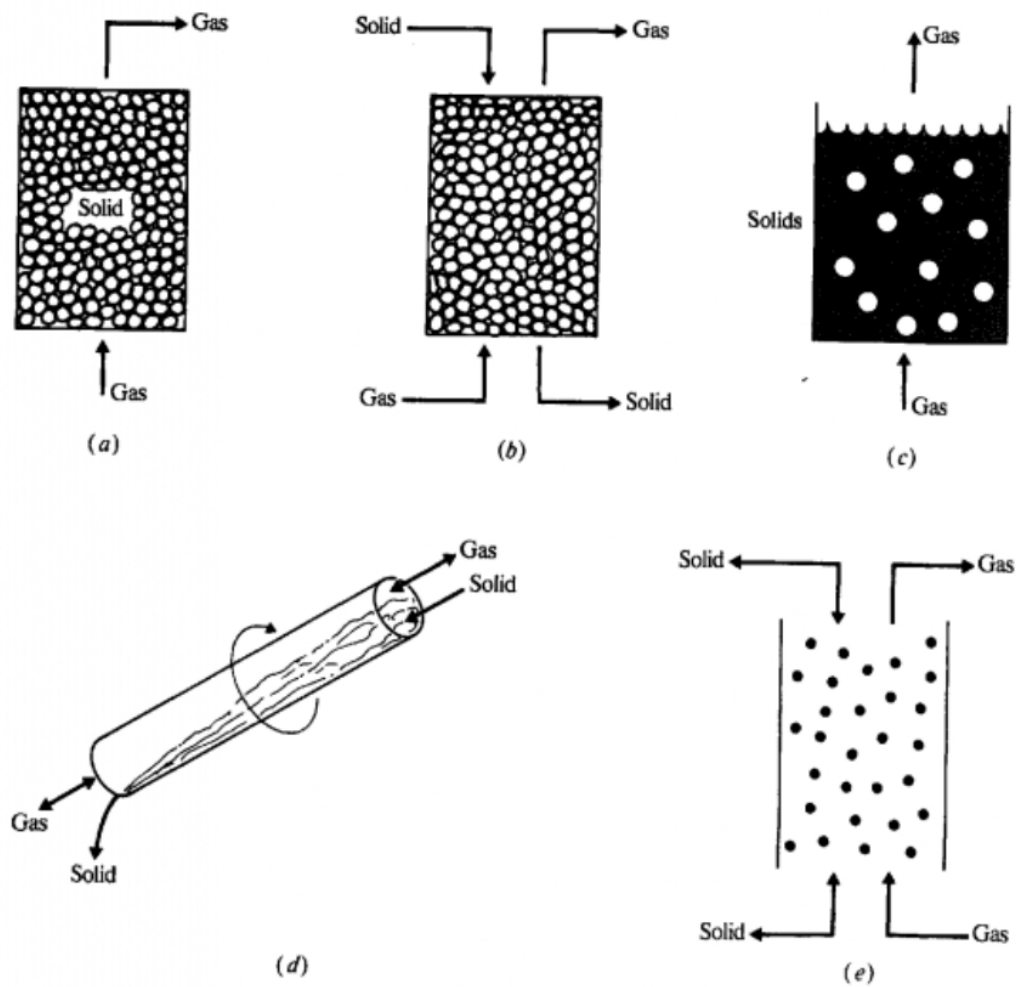


FIGURE 7-14

Gas-solid noncatalytic reactor types: (a) fixed bed, (b) moving bed, (c) fluid bed, (d) kiln with cocurrent or countercurrent gas flow, (e) dilute-phase transport line with cocurrent or countercurrent solids flow.

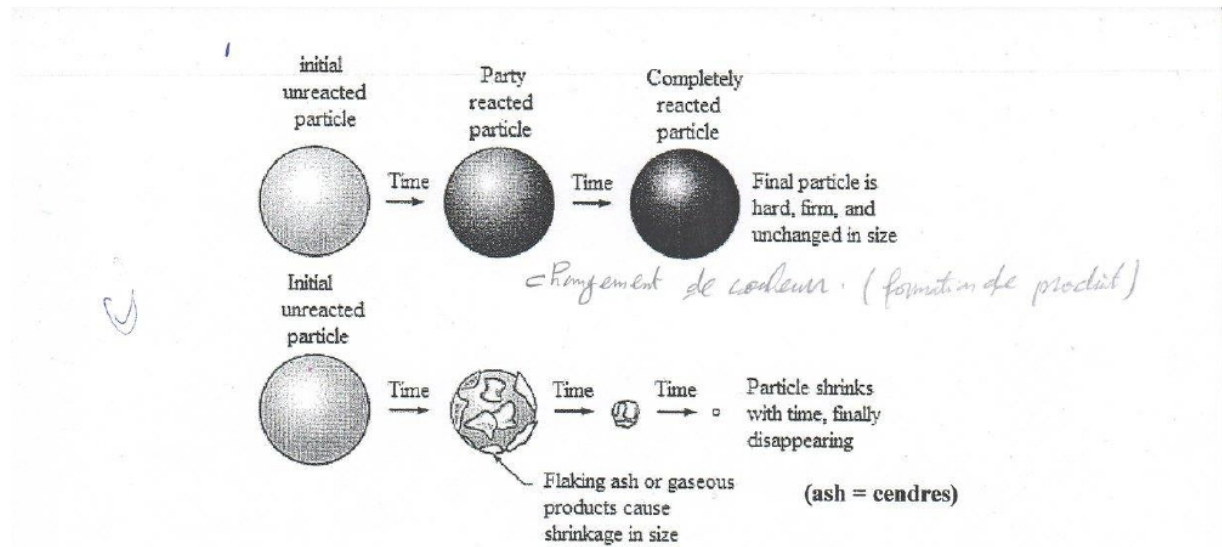


Figure 1. Different sorts of behavior of reacting solid particles.

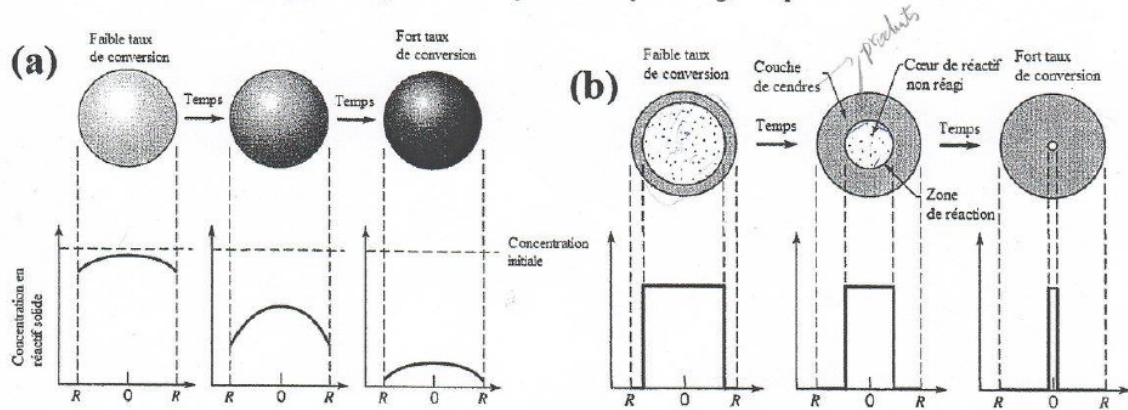


Figure 2. Evolution des profils de concentrations et de la géométrie du réactif solide au cours du temps pour le modèle à conversion progressive (a) et pour le modèle à cœur rétrécissant (b).

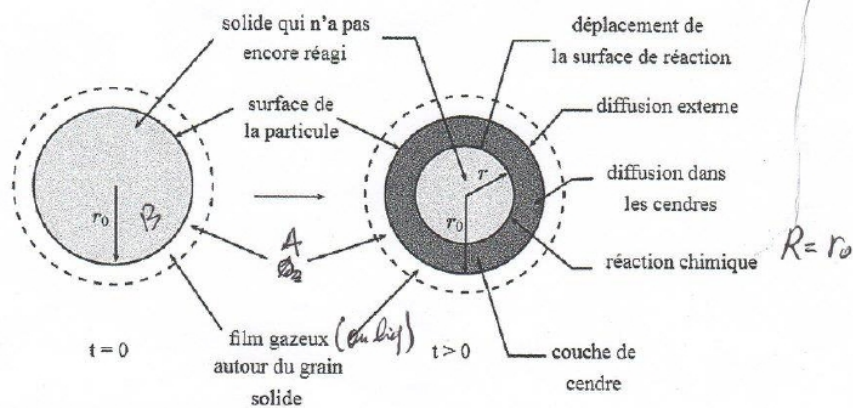


Figure 3. Schéma du modèle à cœur rétrécissant sans changement de taille.

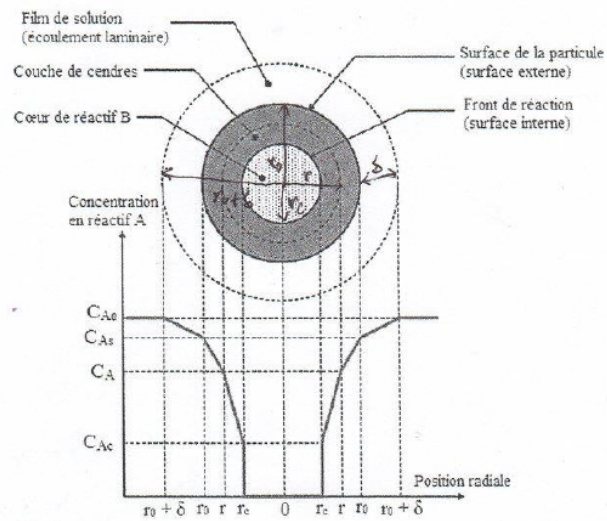


Figure 4. Représentation du profil de concentration du réactif A dans le cas d'une réaction avec particule à cœur rétrécissant sans changement de taille.

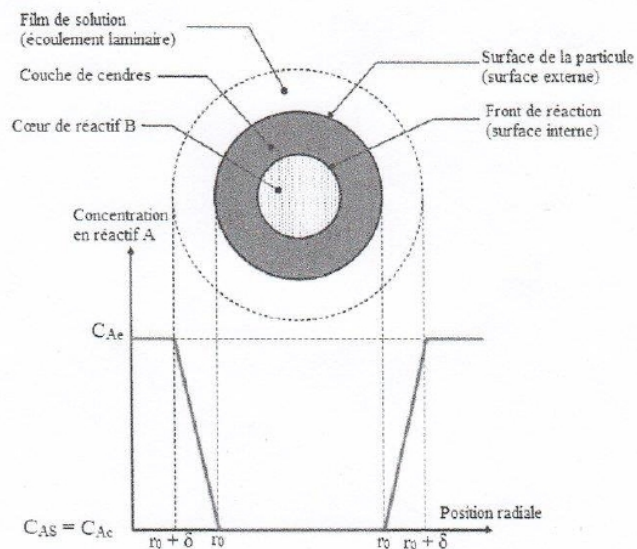


Figure 5. Représentation d'une particule en cours de réaction dans le cas d'un contrôle cinétique par la diffusion du réactif A dans le film (régime externe).

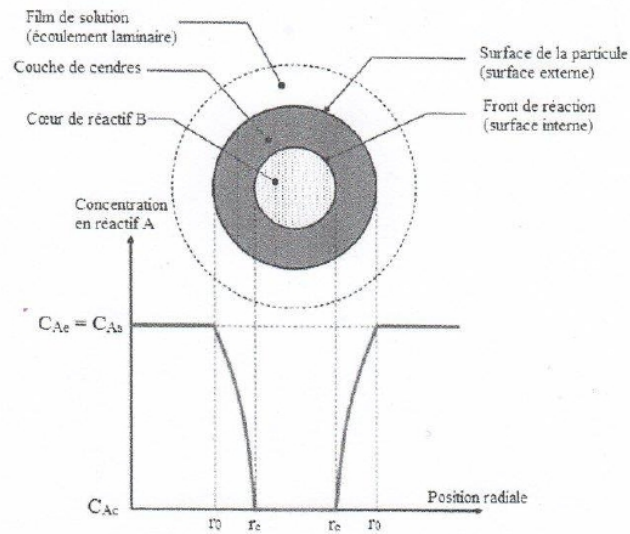


Figure 6. Représentation d'une particule en cours de réaction dans le cas d'un contrôle cinétique par la diffusion du réactif A dans la couche de cendres (régime interne).

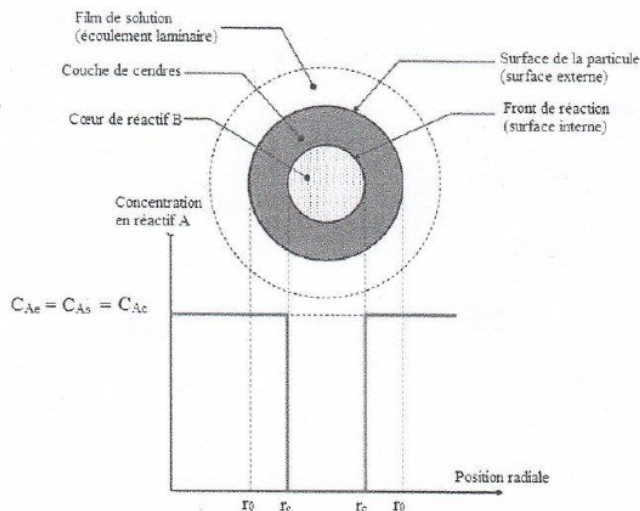
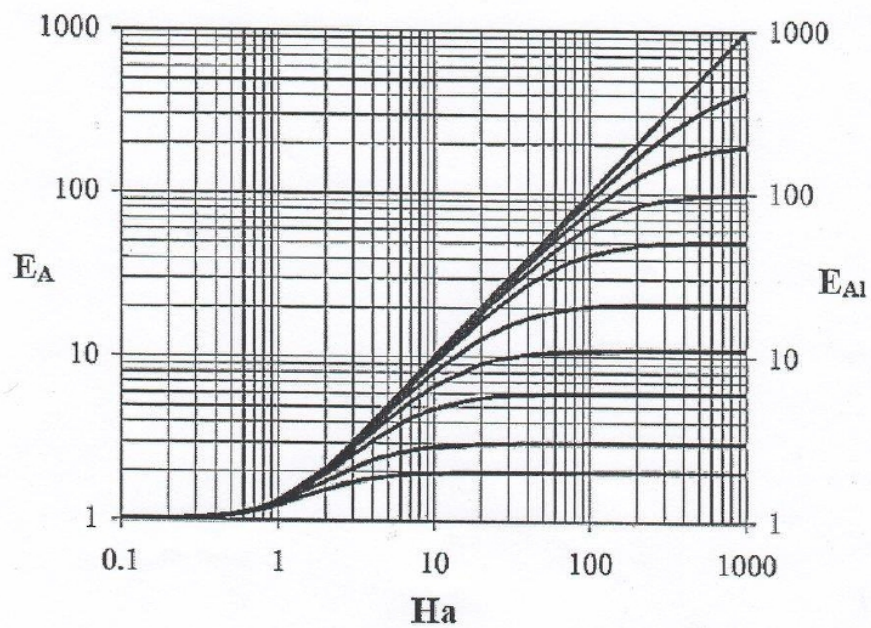


Figure 7. Représentation d'une particule en cours de réaction dans le cas d'un contrôle cinétique par la réaction entre les réactifs A et B à la surface du cœur de la particule (régime chimique).

Abaque de Van Krevelen et Hoftyzer (1948) pour une réaction de pseudo premier ordre

(Facteur d'accélération (E_A) en fonction du critère de Hatta (Ha) et de la valeur d'efficacité limite (E_{Ai}) pour une réaction infiniment rapide).



NB

Le facteur d'accélération (E_A) peut être déduit de l'abaque de Van Krevelen et Hoftyzer, si l'on connaît le nombre de Hatta et E_{Ai} .