



Chapitre III : Approche de la cinétique en réacteur ouvert

Plan :

I- LES DIFFERENTS TYPES DE REACTEURS	2
1- Types d'opération.....	2
2- Types de réacteurs chimiques.....	3
3- Classement des réacteurs selon le degré de mélange.....	5
4- Associations de réacteurs.....	5
II- BILAN DE MATIERE EN REACTEUR OUVERT	6
1- Variables de composition chimique	6
2- Fraction de dissociation et notion de taux de conversion	9
3- Vitesse de réaction, vitesse de disparition d'un réactif R et vitesse de formation d'un produit P....	10
4- Exemple de bilan pour un réacteur ouvert	11
5- Temps de passage	13

Chapitre III : Approche de la cinétique en réacteur ouvert

La fonction essentielle du réacteur est de fournir un **espace** délimité des conditions ambiantes extérieures par une **surface**. Cette **surface** peut être :

- **athermane** : pas d'échange de chaleur avec l'extérieur contrairement à une surface **diathermane** ;
- **perméable** : échange de matière avec l'extérieur. Le système est alors dit **fermé**.

Cette **surface** constitue l'enveloppe d'un **volume** où la **transformation chimique** se produit dans de bonnes conditions de transfert de chaleur et de matière. Le but recherché est d'obtenir un **rendement** ou une **sélectivité optimale**.

Le mariage réacteur-réaction chimique va être principalement conditionné par 3 facteurs spécifiques, à savoir :

- l'**opération**
- le **réacteur**
- et le **type de transformation chimique**.

Au laboratoire, on réalise en général les transformations chimiques en **système fermé**. En effet, les quantités faibles de réactif utilisées autorisent ce type de protocole expérimental **discontinu**.

Au contraire, les industriels préfèrent réaliser les transformations chimiques en **système ouvert** pour des raisons pratiques. Il y a dans ce cas **échange de matière** avec l'extérieur, notamment quand les réactifs et les produits de réaction sont dans un état gazeux. L'alimentation en **continue** d'un réacteur chimique et la récupération en sortie du mélange réactionnel permettent ainsi un **fonctionnement permanent** du réacteur.

Par ailleurs, les industriels utilisent très souvent des **catalyseurs**. Ces espèces chimiques permettent d'accélérer fortement les réactions et donc de réduire les **temps de passage** dans les réacteurs. On utilise aussi en **système fermé** des catalyseurs pour des réactions qui sans cela seraient trop lentes.

Le **génie chimique** correspond à l'application des domaines de la chimie tels que la thermodynamique, la cinétique et la sécurité à l'échelle industrielle. Le **génie chimique** conçoit des réacteurs de taille adaptée pour un bon fonctionnement, un respect des contraintes économiques et environnementales.

Ce paragraphe de cours aborde la cinétique et les bilans de matière en **réacteur ouvert**.

I- Les différents types de réacteurs

1- Types d'opération

Il est reconnu qu'un réacteur peut fonctionner selon trois sortes d'opérations :

- **discontinue** ;
- **semi-continue** ;
- **continue**

a- Opération discontinue

Dans une opération **discontinue**, les réactifs sont chargés dans le réacteur en début d'opération. Les produits sont retirés quand la transformation est considérée comme terminée. Le système est alors dit **fermé**. C'est le cas des transformations chimiques étudiées au laboratoire.

b- Opération semi-continue

Un des réactifs ou un des produits est constamment ajouté ou soutiré du réacteur, alors que les autres sont traités comme dans une opération discontinue. Le système est alors dit **semi-ouvert** ou **semi-fermé**.

C'est par exemple le cas lorsque le dioxygène gazeux est utilisé en tant que réactif dans des réactions d'oxydoréduction ou de combustion. Il est puisé en continu de l'air ambiant.

c- Opération continue

Dans une opération **continue**, les réactifs et les produits sont constamment chargés et soutirés du réacteur. Le système est alors dit **ouvert**.

2- Types de réacteurs chimiques

On considère qu'il y a deux types de **réacteur industriel** :

- la **cuve**
- et le **tube**

a- Réacteur discontinu à cuve agitée

Le réacteur **discontinu** peut être une **cuve**. Il s'agit d'un récipient pour lequel les trois dimensions sont comparables. Il est presque toujours muni d'un dispositif qui assure une **agitation mécanique** du mélange réactionnel. Le milieu réactionnel est alors **homogène**, la composition chimique étant **uniforme** dans tout le volume du réacteur. Le rapport surface sur volume n'est pas très grand pour ce type de réacteur.

Lors de la charge d'un réacteur **discontinu à cuve agitée**, il y a introduction de réactifs à température T et pression P fixées par l'opérateur. La transformation chimique a lieu **sans échange de matière** avec l'**extérieur**. Le système est donc **fermé**. A la fin de la réaction, le réacteur est vidangé pour éliminer les produits formés et les réactifs n'ayant pas réagi. Les exemples de ce type de réacteur sont :

- des **ballons** ou des **béchers** utilisés en TP
- ou **cuve** dont le schéma est représenté ci-dessous :

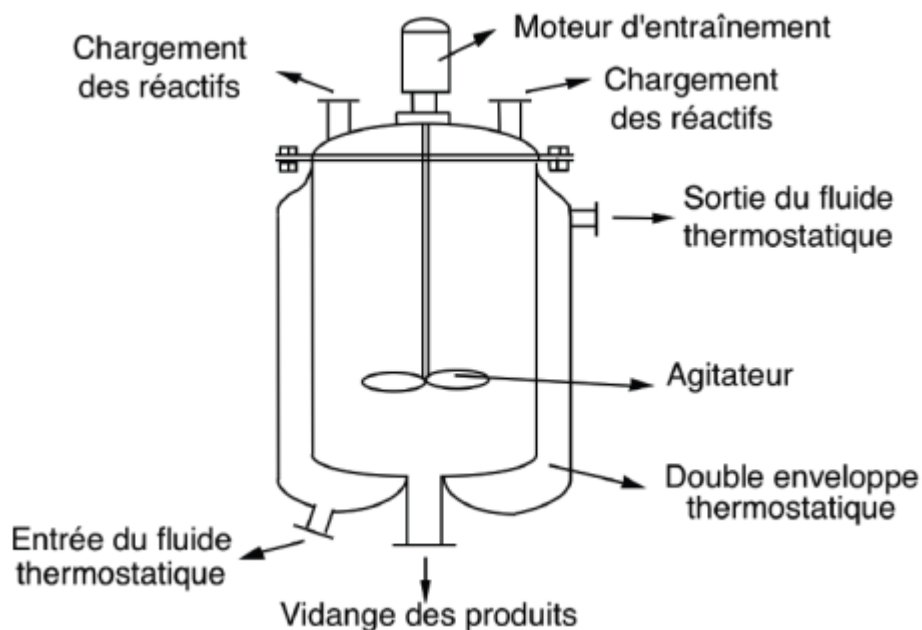


Schéma d'un réacteur discontinu à cuve agitée

b- Réacteur continu à cuve agitée et tubulaire

Le réacteur *continu* est en général :

- une *cuve agitée* dans laquelle un système d'*agitation mécanique* est prévu. Ce système assure que le milieu réactionnel est *homogène*.
- ou un *tube* caractérisé pour ce dernier par une certaine longueur où le mélange réactionnel se déplace à la manière d'un piston. Le rapport surface sur volume est assez grand.

Tous les réactifs sont introduits à l'*entrée* du réacteur (*alimentation*) et tous les constituants en sont extraits par *soutirage* (*sortie*) par un courant total de matière qui s'établit dans le *réacteur ouvert*. Le schéma d'un réacteur *continu* industriel à cuve agitée est le suivant :

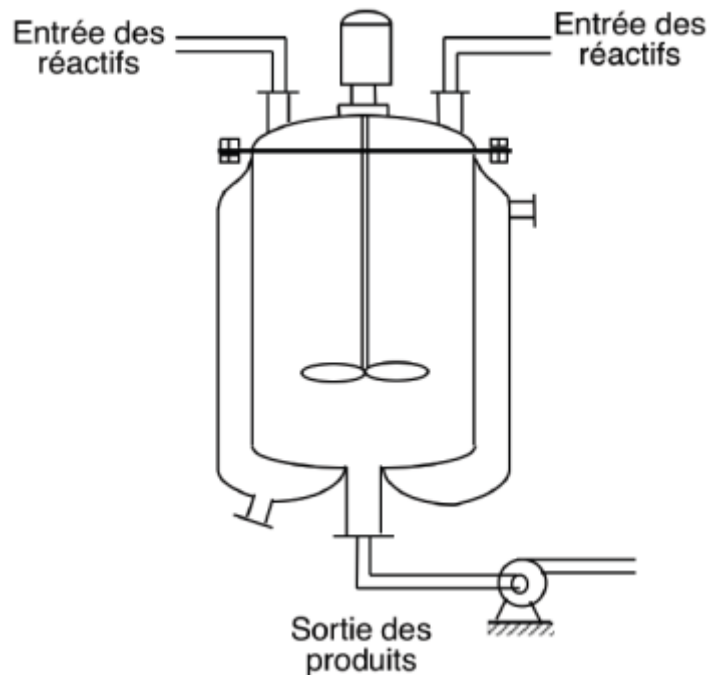


Schéma d'un réacteur continu à cuve agitée

En ce qui concerne le *réacteur tube* ou *réacteur piston*, l'opération sera toujours *continue* et réalisée soit dans un seul tube assez long, soit dans plusieurs tubes identiques placés en parallèle. Dans ce dernier cas, on parle de *réacteur multitubulaire*. La figure suivante est un exemple de ce type de *réacteur continu ouvert* :

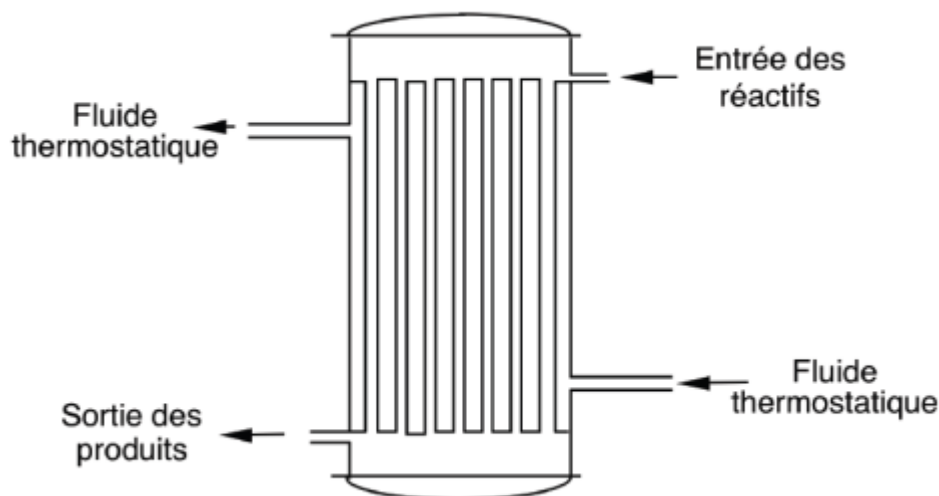


Schéma d'un réacteur continu tubulaire

Dans ce type de **réacteur continu ouvert**, le fluide réactionnel circule en général dans les tubes tandis qu'un fluide caloporteur enrobe les tubes et circule dans l'enveloppe. Le fluide réactionnel peut être gazeux ou liquide. Le fluide caloporteur est adapté aux conditions de l'échange thermique à assurer avec l'extérieur.

Ce type de réacteur est intéressant pour les productions importantes. Il est utilisé quand les réactions sont rapides et qu'elles nécessitent de forts échanges thermiques. Ce réacteur est également bien adapté pour fonctionner sous pression. Les désavantages viennent de l'encombrement (tube de plusieurs mètres) et des risques de bouchage.

Un dernier type de réacteur tube assez courant est le four tubulaire qui est approprié aux transformations chimiques **endothermiques** (nécessitant un apport de chaleur pour avoir lieu). Un combustible est brûlé dans un four réfractaire complètement garni de tubes. La chaleur est transmise aux tubes par radiation (dans le four) et par convection (à la sortie du four et à la cheminée). La transformation chimique se déroule à l'intérieur des tubes portés à la température requise.

c- Réacteur semi-continu

Durant une transformation chimique ayant lieu dans un réacteur **semi-continu**, il y a échange de matière avec l'extérieur. Il existe cependant une espèce chimique active (réactif ou produit) qui n'est ni apportée, ni extraite du réacteur.

L'**oxydation** ou **combustion** d'un hydrocarbure dans un moteur à explosion, une tuyère ou une chaudière thermique nécessite d'utiliser un **réacteur semi-continu**. Le **dioxygène** de l'air est introduit au fur et à mesure de la combustion.

3- Classement des réacteurs selon le degré de mélange

a- Parfaite agitation

La composition chimique (par exemple la concentration) est **uniforme** à tout instant dans tout le réacteur grâce à un système d'**agitation mécanique**. Une seule phase est généralement présente dans le réacteur.

b- Réacteurs à écoulement piston (cas des réacteurs ouverts)

Ce type de réacteurs met en jeu :

- une progression en tranches successives des réactifs et des produits ;
- aucun échange de matière entre les tranches ;
- une variation continue de la composition.

Il s'agit de deux modèles limites de réacteurs !

4- Associations de réacteurs

Associer des réacteurs, c'est les disposer en **parallèle** ou en **série**.

a- Association de réacteur en série

L'association de réacteurs en **série** vise à pouvoir atteindre une conversion finale par paliers successifs la plus élevée possible. Cette association permet une intervention extérieure entre chaque réacteur, comme par exemple :

- refroidir ou réchauffer le mélange réactionnel,
- réinjecter du réactif,
- faire un soutirage...

b- Association de réacteur en parallèle

L'association de réacteurs en **parallèle** vise à augmenter la capacité de production de la section réactionnelle.

Cette association est particulièrement intéressante :

- lorsque la vitesse de réaction est lente
- ou encore lorsque la conversion que l'on peut obtenir est faible.

Cette association ne permet pas d'augmenter le taux de conversion en réactif.

II- Bilan de matière en réacteur ouvert

1- Variables de composition chimique

Les variables de composition chimique sont fonction des états physiques des espèces chimiques. On distingue trois types d'état physique :

- **gazeux** pour lequel on supposera que les gaz ont un comportement de gaz parfait ;
- **liquide ou solide** (état physique dit condensé) ;
- **soluté** : une espèce chimique est dissoute dans un solvant.

Pour chacun de ces états physiques, des paramètres de composition chimiques adéquats sont utilisés pour réaliser des bilans de matière.

a- Etat physique gazeux

i- Fraction molaire

Pour des espèces chimiques gazeuses en mélange, on peut définir la fraction molaire y_i de chacune de ces espèces chimiques notées i .

La fraction molaire y_i en espèce chimique gazeuse i en mélange se définit comme le rapport de la quantité de matière en i sur la quantité de matière totale en constituant gazeux, soit :

$$y_i = \frac{n_i}{\sum_{i \text{ gaz}} n_i}$$

n_i quantité de matière en espèce chimique gazeuse i
 $\sum_{i \text{ gaz}} n_i$ quantité de matière totale en constituant gazeux

La fraction molaire est une grandeur **intensive** : elle est **indépendante** de la taille du système.

ii- Pression totale pour des gaz parfaits

Pour des gaz ayant un comportement de gaz parfaits, la pression totale P s'exprime selon la loi :

$$P = \frac{RT \times \sum_{i \text{ gaz}} n_i}{V}$$

T température (en degré Kelvin)

V volume du réacteur contenant les constituant gazeux (en m^3)

n_i quantité de matière en espèce chimique gazeuse i (en mol)

R constante des gaz parfait ($R = 8,314 \text{ J.K}^{-1}.\text{mol}^{-1}$)

La pression s'exprime alors en Pascal. On rappelle les conversions suivantes d'unité :

$$1 \text{ bar} = 10^5 \text{ Pa}$$

$$1 \text{ atm} = 760 \text{ mmHg} = 1,013 \text{ bar} = 1,013.10^5 \text{ Pa}$$

iii- Pression partielle d'un gaz parfait

La **pression partielle** P_i d'une espèce chimique gazeuse i en mélange et ayant un comportement de gaz parfait est la pression exercée par la seule espèce chimique gazeuse i à la température T et volume V du mélange.