

## 1.1. Généralité

Le "génie de la réaction chimique" est une branche du génie des procédés qui traite des méthodes de mise en œuvre rationnelle des transformations de la matière et des appareils dans lesquels sont conduites les réactions : les réacteurs (figure 1.1).

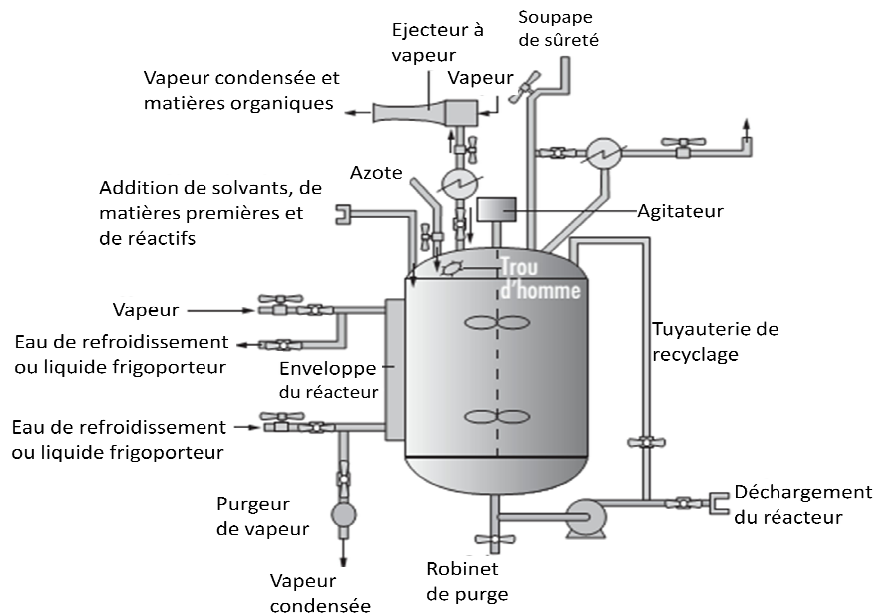


Figure 1.1 Schéma d'un réacteur chimique utilisé en synthèse organique

Si, visitant diverses usines réalisant des fabrications chimiques variées, on s'attache à repérer les réacteurs dans lesquels s'opèrent précisément les transformations chimiques, on peut être surpris par la variété des formes et des dimensions de ces derniers.

C'est quoi donc un réacteur chimique ?

Sur le plan thermodynamique, un réacteur est une portion de l'univers où se produit une réaction chimique. D'un point de vue procédé, est appelé réacteur chimique tout appareillage permettant de réaliser une réaction chimique, c'est-à-dire de transformer des espèces moléculaires en d'autres espèces moléculaires.

En chimie, un réacteur est une enceinte ou récipient apte à la réalisation et l'optimisation de réactions chimiques et généralement de procédés de transformation de la matière (génie des procédés). Le but recherché dans un réacteur est l'homogénéité du milieu réactionnel du point de vue de la température et du mélange des réactifs.

Par exemple :

- cuve : réacteur ouvert à l'atmosphère permettant de faire une transformation chimique ;
- bioréacteur : réacteur permettant de faire une transformation biologique. Dans le cas d'une fermentation, on utilise aussi le terme de fermenteur ;
- grignard : réacteur permettant de travailler sous légère pression ou dépression ;
- autoclave : réacteur permettant de travailler sous forte pression.

Le réacteur constitue le cœur des unités de fabrications chimiques, rencontrées aussi bien dans les raffineries ou les complexes métallurgiques que dans les usines chimiques ou parachimiques. Dans de telles unités industrielles, le réacteur est généralement entouré d'appareillages, placés en amont et en aval, permettant les traitements physiques des matières premières et des produits de la réaction. Son fonctionnement (conversion, distribution des produits) conditionne en grande partie la nature des installations de préparation de la charge et de séparation des produits.

Par ailleurs, on trouve également des réacteurs dans les installations de lutte contre la pollution pour épurer, par voie chimique, un certain nombre d'effluents (gaz de combustion, eaux résiduaires). La conception et l'optimisation du réacteur doivent donc faire l'objet d'une étude attentive. En ce sens, on peut dire que le réacteur est véritablement le cœur du procédé.

### **1.2. Caractéristique des réacteurs chimiques**

La fonction essentielle du réacteur est de fournir un espace délimité des conditions opératoires, de sorte que l'on obtienne un rendement et une sélectivité optimaux. Il exige donc des caractéristiques très diverses, qui doivent répondre généralement aux conditions principales :

- Assurer un rendement élevé.
- Fournir un taux de transformation le plus grand possible.
- Consommer le moins d'énergie pour le transport et l'agitation des réactifs.
- Être suffisamment simple et pas cher.
- Utiliser au mieux la chaleur des réacteurs exothermiques.
- Avoir un fonctionnement sûr et permettre un contrôle automatique du procédé.

L'amélioration de la qualité des matériaux est un facteur important de progrès puisqu'elle permet de fonctionner à des températures plus élevées (ou plus basses), sous des pressions plus fortes (ou des vides plus poussés), avec des produits dont certains sont très corrosifs. Dans leur grande majorité, les réacteurs sont construits en différents types d'acier : non alliés ou faiblement alliés ; résistants à haute pression (multiparois ou multicouches) ; résistants aux fortes températures (revêtement intérieur réfractaire) ; inoxydables, résistants à l'oxydation et aux agents corrosifs.

Il est fait également usage : des verres borosilicate pour les réacteurs en acier vitrifié destinés principalement à la chimie fine, à l'agroalimentaire et à la pharmacie ; des matériaux organiques polymérisés tels que : polychlorure de vinyle, polypropylène, polytétrafluoréthylène (PTFE), résines phénoliques, etc.

### **1.3. Les principaux facteurs gouvernant le fonctionnement d'un réacteur**

Les réacteurs chimiques utilisés dans l'industrie sont d'une très grande variété, leur forme étant fonction :

- des conditions de fonctionnement : température, pression, etc. ;
- des propriétés des produits mis en œuvre : liquides, gaz corrosifs ;

- des propriétés physiques et chimiques à obtenir ;
- de la réaction elle-même : exothermique ou endothermique ;
- de la présence ou l'absence de catalyseurs et de la nature de ceux-ci ;
- des énergies mises en jeu : chauffage, refroidissement, réfrigération.

Le bon fonctionnement de ces appareils est gouverné donc par différents facteurs :

– Les données physicochimiques (thermodynamique) sur la nature des transformations mises en jeu : vitesse des réactions, thermicité, présence d'équilibres, influence de la pression, de la température, de l'état de dilution sur ces paramètres.

– Les données hydrodynamiques sur l'écoulement des phases et leur mode de mélange et de mise au contact. L'hydrodynamique est à son tour étroitement liée aux phénomènes de transfert et de transport de chaleur, de matière et de quantité de mouvement qui accompagnent les réactions (circulation et mise en contact des phases).

– Les données de transfert (de chaleur, de matière et de quantité de mouvement) à l'intérieur d'une phase, entre phases ou entre le mélange réactionnel et la paroi du réacteur, relevant de la cinétique physique, jouent un rôle aussi important que les vitesses de transformations proprement dites, qui sont du domaine de la cinétique chimique ou biologique.

– Structure géométrique qui est celle du réacteur et qui imprime sa marque à l'hydrodynamique et aux transferts physiques en particulier.

– Paramètres opératoires à l'entrée (nature des espèces chimiques entrant dans le réacteur, pression, température, concentrations, débits et temps de séjour des phases) et des résultats de l'opération (taux de conversion des réactifs, nature et distribution des produits, rendements matériels et énergétiques) à la sortie.

#### **1.4. Principales caractéristiques d'une transformation chimique**

Pour une transformation chimique, les principales caractéristiques à retenir sont :

— les espèces chimiques mises en jeu, les relations stœchiométriques et le chemin réactionnel. Pour chacun, la thermodynamique est en mesure de nous préciser les limites au-delà desquelles la transformation n'est pas possible (notion d'équilibre), ainsi que l'effet thermique qui est associé à la transformation (chaleur de réaction) ;

— la nature des phases en présence durant la transformation chimique, avec indication de la *localisation* des réactions ;

— le mode d'activation des réactions (le plus souvent thermique, catalytique ou par radiation). Dans le cas d'utilisation d'un catalyseur hétérogène, ce dernier aura déjà dû être pris en compte lors de l'examen de la caractéristique précédente (phases en présence). Dans ce qui suit, nous ne considérerons que les cas correspondant à une activation soit thermique, soit catalytique, l'activation par radiation (photochimique) n'étant pas prise en compte ;

— la cinétique formelle associée au chemin réactionnel défini précédemment ; il s'agit d'expressions mathématiques traduisant les lois de vitesse des diverses réactions.

## 1.5. Classification des réactions et des réacteurs chimiques

Toute analyse systématique du fonctionnement des réacteurs ne pourra être faite qu'après les avoir classés en un certain nombre de types bien caractérisés et auxquels les appareillages industriels pourront être identifiés.

### 1.5.1. Classification des réactions chimiques

Le choix d'un type de réacteur pour une transformation désirée est lié à la nature de la ou des réactions qu'on désire y produire. Il est donc assez indiqué de commencer par un classement des réactions chimiques. Le tableau 1.1 résume les principaux critères de cette classification.

**Tableau 1.1 :** Classification des transformations (réactions) chimiques

Critère	Type de réacteur
Phases en présence	<ul style="list-style-type: none"> <li>✓ Réaction homogène ou monophasique: le milieu réactionnel est alors constitué par une phase gazeuse ou une phase liquide.</li> <li>✓ Réaction hétérogène ou polyphasiques: on peut ainsi rencontrer les combinaisons suivantes (gaz + liquide ; liquide + liquide ; gaz + solide; liquide + solide ; gaz + liquide + solide ; fluides + solides).</li> </ul>
Selon la vitesse de la réaction	<ul style="list-style-type: none"> <li>✓ Réaction ultra rapide (fractions secondes)</li> <li>✓ Réaction rapide (quelques minutes)</li> <li>✓ Réaction lente (quelques heures ou jours)</li> <li>✓ Réaction très lente (quelques semaines ou années)</li> </ul>
Selon l'ordre de la réaction	<ul style="list-style-type: none"> <li>✓ Ordre entier (ordre 1, ordre 2....)</li> <li>✓ Il existe peu de réaction dont l'ordre est supérieur à 3</li> </ul>
Mécanisme de la réaction	<ul style="list-style-type: none"> <li>✓ Réaction par transfert d'électron</li> <li>✓ Réaction ionique</li> <li>✓ Réaction par formation intermédiaire d'un complexe</li> </ul>
Le mode de réaction Stœchiométrie	<ul style="list-style-type: none"> <li>✓ Réactions simples (isolées) À stœchiométrie unique</li> <li>✓ Réactions composées À stœchiométrie multiple (existence de réactions secondaires):                             <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Réactions équilibrés (opposées)</li> <li>▪ Réactions consécutives (en chaînes)</li> <li>▪ Réactions parallèles (réactions jumelles et réaction concurrentes)</li> </ul> </li> </ul>
Équilibre	<ul style="list-style-type: none"> <li>✓ Irréversibles dans les conditions opératoires</li> <li>✓ Équilibrées dans les conditions opératoires</li> </ul>
Thermicité	<ul style="list-style-type: none"> <li>✓ Athermiques (<math>\Delta H \approx 0</math>)</li> <li>✓ Endothermiques (<math>\Delta H &gt; 0</math>)</li> <li>✓ Exothermiques (<math>\Delta H &lt; 0</math>)</li> </ul>
Sensibilité aux conditions physiques	<ul style="list-style-type: none"> <li>✓ Facteurs chimiques déterminants (microcinétique)</li> <li>✓ Facteurs physiques déterminants : transferts de matière et de chaleur intra et inter-phases (macrocinétique) ; réglage de la pression et de la température.</li> </ul>
Chimie organique	(addition, substitution, élimination,.....)

Parmi les critères énumérés, celui qui domine imprime le plus souvent sa marque à la conception et au fonctionnement du réacteur : dans une réaction gaz-solide, des facteurs déterminants sont les transferts de matière et de chaleur entre phases ; dans une réaction à stœchiométrie unique, on se préoccupe en général d'obtenir le taux de conversion maximal au moindre coût dans le réacteur le plus petit possible, ou dans le plus court temps possible, alors que dans une réaction à stœchiométrie multiple, l'obtention d'une sélectivité élevée prime sur le taux de conversion si le recyclage des substances non converties n'est pas trop coûteux ; dans une réaction exothermique équilibrée, le réglage de la température est capital ; enfin, lorsque l'efficacité de la transformation repose entièrement sur le choix d'un bon catalyseur, le génie de la réaction chimique se tourne à nouveau vers les facteurs chimiques.

### 1.5.2. Classification des réacteurs chimiques

Il existe diverse manière de réaliser pratiquement une réaction, pour l'étudier fondamentalement au laboratoire ou pour l'exploiter industriellement. Plusieurs critères de classement des réacteurs sont possibles.

Ces critères ont une relation soit avec le type du réacteur ou bien le type d'opération en présence. Le tableau 1.2 rassemble des éléments de classification des réacteurs chimiques, qui dépendent essentiellement de différents critères.

**Tableau 1.2 : Classification et types de réacteurs les plus utilisés**

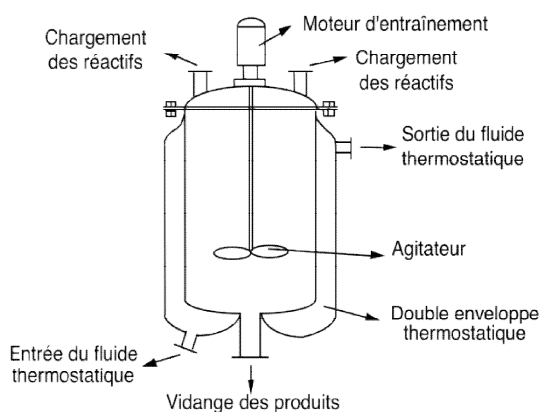
Critère	Type de réacteur
Circulation du mélange Réactionnel (type d'opération)	Réacteur fermé (discontinu, batch) Réacteur semi- fermé (semi-continu, semi-batch) Réacteur ouvert (continu)
Évolution dans le temps	Fonctionnement en régime transitoire Fonctionnement en régime stationnaire ou permanent
État thermique	Réacteur adiabatique. Réacteur iso-thermique.
Degré de mélange des substances en réaction	Réacteur parfaitement agité Réacteur à écoulement piston
Le mode de circulation des phases	Contre courants Courants parallèles (co-courant) Courants croisés
Type de phase du milieu réactionnel	Homogène (phase gazeuse ou phase liquide) Hétérogène (gaz+liq, liq+liq, gaz+sol, liq+sol, gaz+liq+sol)

Nous allons par la suite décrire les principaux réacteurs utilisés industriellement qui sont indiqués dans le tableau 1.2 (ligne par ligne).

### A. Le réacteur discontinu (fermé ou batch)

Un réacteur batch est l'appareillage le plus simple que l'on puisse envisager pour réaliser une transformation chimique, il consiste en un récipient dans lequel les réactifs sont introduits au début de l'opération ; après mise en condition de température et pression, la réaction se déroule jusqu'au taux de transformation désiré. Pendant la réaction, il n'y a pas d'échange de matière avec l'extérieur, ni entrée (non alimenté) ni sortie (pas de soutirage). Les produits sont extraits en fin d'opération.

Cet appareil offrant une grande souplesse, convenant au traitement de petites quantités et de produits coûteux, ou à des travaux de recherche et de mise au point, il apparaît bien adapté pour réaliser une réaction en phase liquide, mais difficilement applicable au cas d'une phase gazeuse; il permet, sans inconvénient, d'avoir un temps de séjour pouvant atteindre 10 ou 20 heures. Son fonctionnement discontinu est assez coûteux, ses domaines d'élection sont donc la chimie fine, la pharmacie, la parapharmacie, la polymérisation en discontinu...



**Figure 1.2** Réacteur discontinu à cuve agitée

Les éléments essentiels constituent cet appareillage étant.

- un récipient capable de contenir un volume de mélange réactionnel ;
- une surface utilisable pour l'échange thermique; cette surface peut être disposée à l'intérieur du réacteur (serpentins, plaques), ou à l'extérieur (où le dispositif d'échange thermique est un échangeur classique pour le liquide ou un condenseur pour la phase vapeur). Elle peut être encore la paroi du réacteur (double enveloppe). Il est évident que ces divers systèmes peuvent parfois être utilisés simultanément;
- un système d'agitation pour mélanger si nécessaire les réactifs au début de l'opération et faciliter le transfert thermique avec la surface d'échange ;

L'inconvénient principal d'un réacteur batch est le coût de la main-d'œuvre, inclut le moment où il prend pour remplir le réacteur, le chauffer à la température de réaction, le

refroidir à la fin de la réaction, décharger le contenu du réacteur, et le nettoyer pour le prochain usage.

D'une manière générale, le fonctionnement d'un réacteur discontinu peut être divisé en cinq phases successives plus ou moins distinctes :

1. chargement des réactifs dans le réacteur (jusqu'au temps  $t_1$ ) ;
2. mise en conditions de température et de pression (de  $t_1$  à  $t_2$ ) ;
3. phase de réaction proprement dite (de  $t_2$  à  $t_3$ ) ;
4. retour aux conditions normales de température et de pression (de  $t_3$  à  $t_4$ ) ;
5. vidange du réacteur (de  $t_4$  à  $t_5$ ).

L'intégration de ce type d'appareils dans une grosse unité industrielle continue pose à l'évidence des problèmes. Au début de l'automatisation de ce type d'unité, ces problèmes sont devenus plus aigus, si bien que l'élimination des appareils discontinus était un facteur de modernisation.

### B. Le réacteur *semi-continu (semi-fermé ou semi-batch)*

Un réacteur semi fermé (semi batch) est un appareillage qui permet de réaliser une transformation chimique, dans lequel un réactif est ajouté ou un produit est extrait en cours d'opération. Le réacteur semi continu ne diffère de la marche en discontinu que par les appareils annexes, il est fréquemment employé dans divers industries (pharmacie, biotechnologie, Chimie de spécialité, formulations, chimie fine, agro-alimentaire etc.). Il est également recommandable dans le cas d'une réaction violente et dangereuse (par exemple nitrations organiques contrôlées par l'addition continue d'acide nitrique), où l'on doit limiter la concentration de B dans la séquence complexe:  $A + B \rightarrow P$  (produit désiré) et  $2 B \rightarrow Q$  (produit parasite). Il n'est pas fort rencontré dans l'industrie de base.

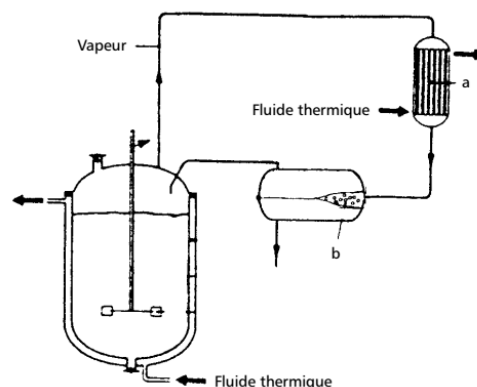


Figure 1.3 – Réacteur semi-continu avec élimination d'une vapeur :  
a) condenseur; b) décanteur

#### *Avantages :*

- ✓ Permet un contrôle de la concentration (meilleure sécurité).
- ✓ Permet des réactions nécessitant des variations des conditions opératoires (notamment changement de la concentration des réactifs).

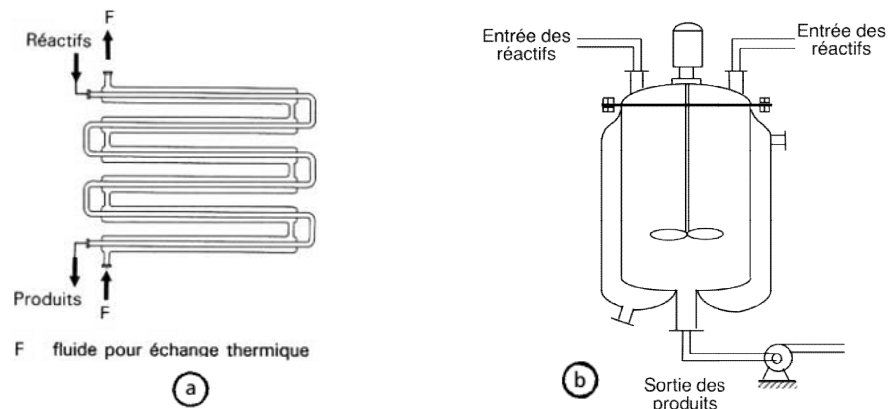
- ✓ Meilleure conversion en cas d'inhibition par le substrat.
- ✓ Permet d'atteindre de très hautes densités cellulaires en biotechnologie.

**Désavantages :**

- ✓ Nécessite un excellent contrôle du flux d'entrée (danger d'accumulation des réactifs).
- ✓ Nécessite un temps mort entre chaque opération (remplissage, vidange, nettoyage) qui nuit à la performance.

**C. Réacteur ouvert ou continu**

Les réacteurs continus sont caractérisés par une introduction des réactifs et un soutirage des produits en continu. Pour assurer le bon déroulement de la réaction dans un appareil continu, deux stratégies peuvent être mises en œuvre : soit privilégier le brassage (cuve agitée), soit y renoncer et faire circuler le mélange réactionnel dans un dispositif qui s'apparente à un tuyau (Figure 1.4).



**Figure 1.4** – Réacteur continu: a) réacteur tubulaire; b) à cuve agitée.

L'opération continue en cuve permet cependant d'accroître la production par une diminution des délais.

**Avantages :**

- ✓ Peu de variation dans la qualité d'un produit sur une longue période de temps. Haute performance.
- ✓ Bon pour des études cinétiques.
- ✓ Travaille à des faibles concentrations de réactifs (meilleure sécurité, meilleure conversion pour des ordres de réactions inférieurs à 1 ou en cas d'inhibition par le substrat).

**Désavantages :**

- ✓ Moins bonne conversion pour des ordres de réactions supérieurs à 1 ou en cas d'inhibition par le produit. Nécessite un excellent contrôle des flux (entrée et sortie).



✓ Ne permet pas des réactions nécessitant des variations des conditions opératoires.

### C.1. Le réacteur continu à cuve agitée

Le réacteur continu agité est celui qui correspond à la première stratégie, ce n'est pas autre chose que le réacteur discontinu, auquel on a ajouté une (ou des) alimentation(s) et un dispositif de soutirage en continu.

### C.2. Le réacteur tubulaire

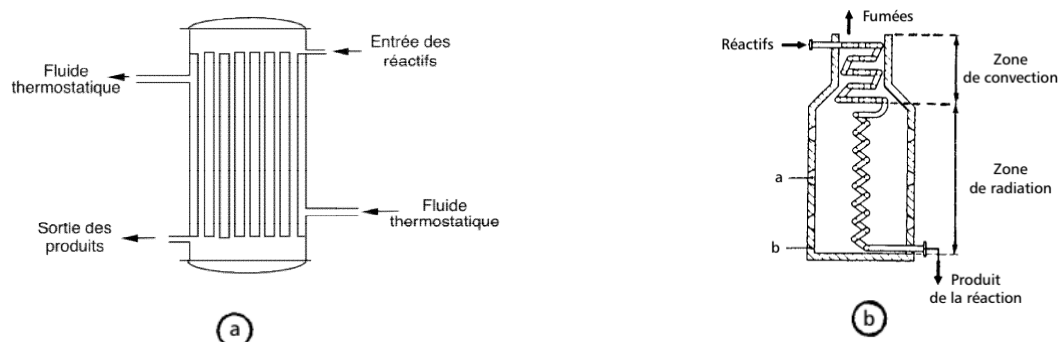
Dans le cas du réacteur tubulaire, l'opération sera réalisée soit dans un seul tube assez long, soit dans plusieurs tubes identiques placés en parallèle. Dans ce dernier cas, on parle de réacteur multitubulaire. Dans ce type de réacteur l'espèce chimique progresse en même temps que son environnement tout au long du tube en se transformant progressivement. On conçoit donc que s'établisse un profil, continu et décroissant, de concentration du réactif considéré entre l'entrée et la sortie du réacteur. Dans ce type de réacteur continu, le fluide réactionnel circule en générale dans les tubes tandis qu'un fluide caloporteur enrobe les tubes dans l'enveloppe.

Le fluide réactionnel peut être gazeux ou liquide. Ce réacteur est intéressant pour les productions importantes. Il est utilisé quand les réactions sont rapides et quelles nécessitent de forts échanges thermiques. Il est également bien adapté pour fonctionner sous pression.

Les Réacteurs tubulaires, très répandus à l'échelle industrielle, sont exploités pour les réactions en phase gazeuse homogène nécessitant une température élevée et un important débit d'échange thermique, il est également bien adapté pour fonctionner sous pression. Les avantages viennent de l'encombrement (tube de plusieurs mètres) et des risques de bouchage. Il s'agit, comme leur nom l'indique, de simples tubes dont le diamètre varie entre 80 et 150 mm et la longueur entre 70 et 90 m. En fonction de la température de fonctionnement (température de la réaction), on distingue (Figure 1.5):

- les réacteurs à tubes concentriques (température inférieure à 500 °C) dans lesquels un fluide caloporteur (eau chaude, vapeur, sel fondu) circule entre les deux tubes; on peut citer comme exemple typique la polymérisation de l'éthylène;

- les réacteurs disposés dans un four et chauffés au moyen de brûleurs à gaz ou à fuel à des températures supérieures à 500 °C. Le tube est en forme d'épingles avec des longueurs droites comprises généralement entre 6 et 12 m. C'est le cas, par exemple, des réacteurs de cracking thermique et de steamcracking des hydrocarbures.



**Figure 1.5** – Réacteurs tubulaires : a) à tubes concentriques; b) un four

Lorsque le réacteur tubulaire traite deux phases fluides, il correspond alors aux colonnes à contre-courant que l'on utilise pour faire absorber un gaz par un liquide ou pour l'extraction liquide – liquide. Pour favoriser les contacts entre les phases, ces colonnes sont munies de plateaux ou de garnissage.

Quand les produits sont très visqueux, on peut utiliser des réacteurs tubulaires verticaux exploitant la technique de la couche mince.

### **Réacteur en (à) écoulement piston**

C'est un réacteur tubulaire à écoulement piston. Ce terme signifie que réactifs et produits progressent en bloc (comme un piston dans un cylindre) en tranches parallèles successives n'échangeant pas de matière entre elles (il n'y a pas de mélange), la composition évolue le long du réacteur au fur et à mesure que la réaction se produit.

Le Réacteur piston en régime permanent convient aux réactions rapides, au traitement de grandes quantités de produits bon marché, il est bien adapté pour fonctionner sous pression. On arrive à une excellente qualité de produits mais les servitudes de fonctionnement et de régulation peuvent constituer un investissement coûteux. Il est très employé dans l'industrie de pétrole par exemple.

L'écoulement de type piston (figure 1.6) est réalisé lorsque l'on fait circuler à grande vitesse un fluide peu visqueux dans un tube (la charge progresse en bloc sans se mélanger le long de l'axe du réacteur); il est caractérisé par un temps de séjour unique pour toutes les molécules;



**Figure 1.6** – Réacteurs à écoulement piston

#### **Avantages :**

- ✓ Peu de variation dans la qualité d'un produit sur une longue période de temps. Haute performance.
- ✓ intéressant pour les productions importantes.
- ✓ moins grand investissement à cause d'une instrumentation requise moindre

#### **Désavantages :**

- ✓ Nécessite un excellent contrôle des flux (entrée et sortie).
- ✓ l'encombrement (tube de plusieurs mètres) et des risques de bouchage.

**Tableau 1.3 : Comparaison entre système fermé et système ouvert**

	<b>Continu (système ouvert)</b>	<b>Batch (système fermé)</b>
<b>Avantages</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Meilleur rendement énergétique</li> <li>• Faible coût de fonctionnement</li> <li>• Qualité finale constante</li> <li>• Automatisation possible</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Adapté aux solides, liquides, gaz et pâtes</li> <li>• Souplesse d'utilisation</li> <li>• Multifonctionnalité</li> </ul>
<b>Inconvénients</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Plus sensible à la fiabilité de chaque équipement</li> <li>• Peu adapté aux solides et pâtes</li> <li>• Manque de flexibilité (changement de produits)</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Rendement global faible</li> <li>• Coût de fonctionnement élevé</li> <li>• Qualité finale pouvant varier</li> <li>• Surveillance accrue</li> </ul>

**D. Réacteur *parfaitement agité*** (composition uniforme, mélange parfait) : La conséquence de l'agitation est que la composition du mélange réactionnel, pression et température sont uniformes en tous points du réacteur à un instant donné, à l'exception du point d'admission dans le réacteur où il y a une discontinuité de la concentration. Le réacteur peut être fermé, semi-fermé, ou ouvert. Le réacteur parfaitement agité (RPA) continu ou semi-fermé se caractérise par sa souplesse et par la facilité du réglage des concentrations ou de la température dans le cas des réactions fortement thermiques. L'écoulement à travers un récipient parfaitement mélangé (agité) fait appel à un réacteur ouvert dans lequel la composition du mélange en cours de réaction est uniforme (donc la même que celle du courant de sortie), et les temps de séjour peuvent varier de 0 à  $\infty$ .

Dans la pratique industrielle, les réacteurs parfaitement agités sont de simples récipients cylindriques munis d'un dispositif d'agitation interne efficace ainsi que d'une tubulure d'alimentation et d'une tubulure de soutirage. Le temps de séjour est situé entre dix minutes et quatre heures. Ces réacteurs se distinguent le plus souvent les uns des autres par leur système d'agitation et par leur mode de chauffage ou de refroidissement. En ce qui concerne l'agitation, on utilise, le plus souvent, un dispositif rotatif : les ailettes, fixées en bout de l'axe et ayant pour rôle de brasser le liquide, le gaz ou le solide, sont de tailles et de formes très variables.

#### **E. Réacteur adiabatique**

Le réacteur adiabatique, souvent rencontré industriellement, constitue simplement un cas particulier du cas général correspondant à une surface d'échange nulle.

#### **G. Fonctionnement en régime transitoire** (non stationnaire ou fonctionnement discontinu)

Il existe au moins un paramètre de fonctionnement (composition, débit, etc.) qui est fonction du temps. Les réacteurs fermés et semi-fermés fonctionnent obligatoirement en régime transitoire ou discontinu.

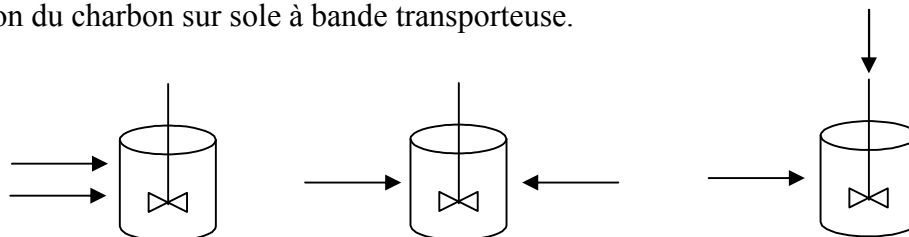
### H. Fonctionnement en régime stationnaire ou permanent

Ce régime ne s'applique qu'aux réacteurs ouverts. Tous les paramètres sont stationnaires, la variable temps disparaît. On dit aussi que le réacteur fonctionne en continu. C'est évidemment le régime le plus intéressant dans la pratique industrielle.

### I. Réacteur selon le mode de circulation des phases

De la même façon que pour les appareils de séparation, on a le choix entre divers modes de circulation des phases : à courants parallèles (co-courant), à courants croisés ou à contre-courant. Si ce dernier mode de circulation est le plus utilisé, dans le cas des processus purement physiques c'est la rétention des phases (spécialement celle de la phase réactionnelle) qui constituera l'un des paramètres essentiels lors de l'étude d'un réacteur polyphasique.

Dans la pratique on retrouve le réacteur à co-courant dans le cas de l'Hydrodésulfuration catalytique, le réacteur à contre-courant pour l'absorption réactive d'un gaz dans un réacteur à ruissellement, dépollution..., et le réacteur à courants croisés comme dans la combustion du charbon sur sole à bande transporteuse.



**Figure 1.8** Réacteur selon le mode de circulation des phases  
a : à co-courant, b : à contre-courant, c : à courants croisés

### J. Réacteurs polyphasiques (ou hétérogènes)

Parmi les plus répandus dans cette catégorie, on trouve les réacteurs à deux phases fluides et les réacteurs catalytiques.

#### Réacteurs à deux phases fluides

Il s'agit habituellement des réacteurs dans lesquels sont présentes soit une phase gazeuse et une phase liquide, soit deux phases liquides non miscibles.

La condition essentielle pour obtenir une réaction efficace étant le transfert rapide de masse, les critères importants pour évaluer un tel réacteur sont :

- l'aire interfaciale;
- le rapport du débit masse (ou volume) de gaz au débit de liquide;
- l'énergie nécessaire pour mélanger les phases.

Les réacteurs gaz-liquide les plus courants sont : les colonnes à bulles, à plateaux et à garnissage, les appareils à agitation mécanique et les laveurs de gaz, les réacteurs à couche-mince.

### **Réacteurs catalytiques**

Ce sont les plus répandus. Ils se distinguent à la fois par le mode de chauffage, le mode de travail (continu, périodique, cyclique); la nature du catalyseur (solide, liquide), le mode de récupération ou de régénération du 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.

#### ***a. Réacteurs à lit fixe***

Dans un *réacteur à lit fixe*, le catalyseur de forme solide (particules sphériques ou cylindriques de 1 à 5 mm) est disposé en général dans des tubes de plusieurs mètres de long ou même de plusieurs dizaines de mètre. Le fonctionnement (pour une bonne rentabilité le catalyseur doit durer des milliers d'heures) est assuré jusqu'à ce que le catalyseur soit épuisé. Si le lit de catalyseur est constitué par un seul tube (l'enveloppe du réacteur) le réacteur est dit à *lit fixe adiabatique*.

#### ***b. Réacteurs à lit mobile***

Les *réacteurs à lit mobile* ont un lit de catalyseur en mouvement ; c'est-à-dire que le catalyseur s'écoule de haut en bas par gravité, tandis que la phase fluide peut s'écouler à cocourant, à contre-courant ou horizontalement. Ce type de réacteur permet ainsi la régénération du catalyseur en continu mais les applications sont limitées étant donné le phénomène d'attrition (l'usure des grains de catalyseur par frottement).

#### ***c. Réacteurs à lit fluidisé***

La technique du *lit fluidisé*, dans laquelle le catalyseur en particules très fines est rendu fluide par entraînement avec les réactifs, présente des avantages dans les deux cas suivants :

- lorsque l'appareil requiert une élimination ou un apport important de chaleur ;
- lorsqu'il est nécessaire de régénérer fréquemment le catalyseur.

### **K. Réacteurs spéciaux**

Il existe néanmoins quelques réacteurs avec des caractéristiques particulières, non assimilables aux critères retenus pour la classification. À titre d'exemple, le réacteur peut être du type tubulaire pour une phase et parfaitement agité pour une autre phase. Face à de telles situations, le caractère dominant est cependant souvent facile à déceler en se référant à la phase réactionnelle ou à celle contenant les réactifs et/ou les produits principaux. On peut citer :

#### **a. Réacteurs thermiques**

La réaction recherchée s'effectue sans autre concours que celui de la chaleur, en portant la matière première à la température convenable pour provoquer, en général, une dissociation des molécules. Le cas le plus souvent cité est celui du craquage thermique de certains produits pétroliers.

### **b. Réacteurs électrochimiques**

Tout dispositif dans lequel se produit une réaction sous l'effet d'un apport d'énergie électrique peut être désigné par l'expression « réacteur électrochimique ». En conséquence, un réacteur électrochimique désignera indifféremment des appareillages plus habituellement connus sous les dénominations « électrolyseur », « cellule d'électrolyse » ou « cellule électrochimique ». Les cuves électrolytiques sont très souvent équipées d'accessoires spéciaux.

### **c. Réacteurs à couche mince**

Bien que conçus pour réaliser des opérations physiques d'évaporation, de distillation, d'adsorption ou de désorption, les appareils à couche mince ont des caractéristiques particulières qui peuvent être exploitées avec profit aussi dans le domaine du génie de la réaction chimique.

Les applications pratiques sont en tant que réacteurs pour :

- une réaction fortement exothermique se déroulant dans une phase liquide très visqueuse ;
- une réaction exothermique en phase liquide, un des réactifs étant transféré à partir d'une phase gazeuse ;
- une réaction endothermique dans une phase liquide visqueuse avec production d'un composé dont la vaporisation ou la désorption présente de l'intérêt sur le plan de la thermodynamique (réaction équilibrée) ou sur le plan de la sélectivité (réactions consécutives non souhaitables).

## **1.6. Les critères de choix du type de réacteur**

Lorsque, disposant de résultats préliminaires provenant du laboratoire et de renseignements tirés de la littérature, on se propose de comparer diverses solutions technologiques, apparaît très rapidement la nécessité de sélectionner le type du réacteur pour la réalisation industrielle. Ce choix est basé sur les critères suivants : la nature des transformations mise en jeu, la nature et le nombre des phases en présence, les technologies utilisables à l'échelle industrielle, le caractère continu ou discontinu des opérations envisagées.

Pour chaque type de réacteur considéré on doit nettement mettre en lumière les données qui seront nécessaires lors de la conception de l'appareillage industriel. Le bilan des connaissances, effectué en comparant les données qui sont nécessaires à celle qui sont disponibles, doit faire apparaître les objectifs qui devront être fixés pour des expérimentations complémentaires.

Pour concevoir donc le meilleur réacteur possible afin de réaliser une réaction donnée, il faut d'abord choisir le ou les facteurs que l'on a intérêt à privilégier, qui peuvent être :

- le taux de conversion d'un réactif donné ;
- le rendement en produit cherché, c'est-à-dire la sélectivité dans le cas très fréquent où la réaction cherchée est accompagnée d'une ou de plusieurs réactions parasites; la recherche de cette sélectivité peut en effet amener à se contenter d'un faible taux de conversion, surtout si les réactifs sont faciles à isoler des produits de la réaction en vue de leur recyclage ;
- la minimisation de la formation d'une impureté très difficile à séparer, ou susceptible de créer des problèmes (pour la sécurité, l'environnement, sa destruction, etc.) ;
- la minimisation du volume global, autrement dit la maximisation de la capacité de production, ou la minimisation des investissements ;
- la sécurité du fonctionnement ;
- la qualité du produit obtenu.

Mais il faut tenir compte de bien d'autres facteurs, notamment :

- de la nature des réactifs et des produits de la réaction. Le réacteur ne peut en effet être le même selon qu'il s'agit d'une réaction en milieu homogène entre gaz ou entre liquides, ou d'une réaction entre deux phases liquides, entre un gaz et un liquide, entre des liquides mais avec production d'un gaz, entre des solides fondus, etc. ;
- de la gamme de température et de pression à l'intérieur de laquelle la réaction se déroule ;
- de la quantité de chaleur mise en jeu dans la transformation. Cette dernière peut être endothermique, athermique ou exothermique. On doit remarquer à ce propos, à titre d'exemple, qu'une réaction rapide et fortement exothermique orientera sur un réacteur en continu, même si les tonnages sont relativement modestes, et que la conception du réacteur sera influencée par l'intérêt qu'il y a à utiliser la chaleur produite, ou une partie de celle-ci, pour amener les réactifs à la température de la réaction.

La prise en compte de l'ensemble de ces facteurs peut entraîner des exigences plus ou moins contradictoires, et il faut d'abord satisfaire celles qui s'imposent du fait de la nature de la réaction, des phénomènes thermiques qui l'accompagnent, des problèmes de sécurité, et des problèmes de qualité du produit obtenu. Ces exigences étant supposées remplies, c'est en définitive la solution offrant le prix de revient global le plus bas (matière première, énergie, main d'œuvre, amortissements) qui conduira au choix de la solution.

- Dans les milieux hétérogènes, comme il est possible de s'en rendre compte, les transferts de matières et de chaleur au niveau moléculaire devront être suffisamment accélérés (agitation, débit suffisant, granulométrie appropriée), **afin qu'ils ne ralentissent pas la réaction chimique elle-même.**
- Le **choix** entre un réacteur cuve (récipient) et un réacteur piston (long tube) dépend fatalement de **plusieurs critères.**

Le type de phase à traiter est un premier critère, les tubes conviennent mieux pour les gaz que les cuves (les transferts de chaleur par un gaz ne sont guère favorisés), tandis que les cuves conviennent mieux aux liquides (les pertes de charge risquent d'être plus élevées dans un tube parcouru par un liquide).

Pour les réactions en phase hétérogène, le choix dépendra des phases en présence et surtout de la phase qui va assurer essentiellement le transfert de chaleur. Cela va aussi dépendre de l'exothermicité ou de l'endothermicité de la réaction. Les transferts de chaleur sont inévitablement déterminants dans le choix du type de réacteur. S'il faut évacuer ou amener de la chaleur rapidement, il faut un réacteur où le rapport surface sur volume soit assez grand comme dans le cas du tube de petit diamètre.

Si on reconnaît que le réacteur chimique est d'abord conçu en fonction de la transformation de matière, il ne faut tout de même pas perdre de vue l'aspect thermique, ce qui veut dire que le réacteur doit aussi être adapté à la capacité de transférer la chaleur efficacement en vue d'assurer sa stabilité.

De toute façon, le choix est rarement simple et il doit être basé de ces considérations, ayant parfois des implications contradictoires.

- Un dernier commentaire concerne les matériaux de construction des réacteurs. Si certains procédés industriels impliquent des molécules pas trop mordantes (hydrocarbures, etc.), cela veut dire que le réacteur pourra être construit à l'aide de matériaux traditionnels comme l'acier ordinaire car ce dernier est moins cher et il se façonne assez bien. D'autre part, lorsque les réactions mises en jeu impliquent des acides (comme  $\text{CO}_2$ ,  $\text{NO}_2$ ,  $\text{SO}_3$ ,  $\text{H}_2\text{S}$ , etc.) ou encore des solides, alors les équipements métalliques auront intérêt à être protégés (ce qui sera plus cher). Les aciers alliés au cuivre, au titane, au molybdène ou encore les aciers inox sont régulièrement utilisés comme matériaux de construction.

**Tableau 1.4 : résumé des réactions et des réacteurs**

Opération → Réaction type ↓	Discontinue	Continue
Homogène L	Cuve	Cuve, tube
Homogène G	Incompatible	Tube
Hétérogène G-S	Incompatible	Tube à lit fixe, Tube à lit fluidisé, Tube à lit mouvant
Hétérogène G-L	Incompatible	Tube à bulles, Tube à empilage, Cuve
Hétérogène L-L	Cuve	Cuve, tube
Hétérogène L-S	Cuve	Cuve
Hétérogène G-L-S	Incompatible	Tube à bulles, Tube à lit fixe, Cuve

### 1.7. Construction et dimensionnement des réacteurs chimiques



Il existe des réacteurs de toutes tailles et de toutes formes. Dans les procédés continus, le réacteur est en général construit sur mesure, en fonction des spécificités de la réaction. Dans les procédés discontinus, on utilise des réacteurs polyvalents normés.

En générale un réacteur chimique, a souvent une forme cylindrique verticale avec fond elliptique. Sa construction est telle qu'il pourra résister au vide ou à une certaine pression interne.

Le matériau retenu pour le réaliser est souvent sélectionné en vue d'utilisations variées ; à ce titre, l'acier inoxydable, le verre et l'acier verré constitue une solution particulièrement intéressante du fait de sa résistance à la corrosion et de sa facilité de nettoyage. Le tableau 1.3 indique les caractéristiques principales de quelques réacteurs standards vendus dans le commerce :

**Tableau 1.3 : Caractéristiques de réacteurs standards en acier verré**

Capacité (m <sup>3</sup> )	1	4	8	10	25	40
Diamètre (m)	1.2	1.8	2.2	4.2	3	3.4
Hauteur utile (m)	1.2	2	3	3.18	4.75	4.79
Surface d'échange (m <sup>2</sup> )	4.6	11.7	18	20.7	39.5	55.2
Pression de service : 0 à 0,7 MPa.						
Température de service : - 20 à 250C°.						

### 1.7.1. Les buts du dimensionnement des réacteurs

Le «calcul» d'un réacteur chimique peut recouvrir des activités diverses. Cela peut être :

- le dimensionnement d'un réacteur (le volume du réacteur, et dans certains cas, certaines caractéristiques géométriques) capable de réaliser une production donnée, connaissant la composition des flux d'alimentation et les spécifications des produits,
- l'adaptation d'un réacteur existant à une production nouvelle,
- l'étude de la conduite optimale du réacteur :
  - ✓ la composition, l'état physique, la température et la pression du mélange qui sort du réacteur,
  - ✓ les variations de température dans le réacteur et les échanges thermiques avec l'extérieur,
  - ✓ les conditions de pression dans le réacteur et les pertes de charge correspondantes.

Pour aborder ces problèmes, nous privilégierons le point de vue du constructeur qui doit répondre à la question suivante : comment concevoir un réacteur devant assurer une production donnée, avec des flux d'entrée de composition connue ?

Pour mener à bien une telle entreprise, il faut tout d'abord prendre un certain nombre de décisions qui sont loin de résulter toutes de «calculs», au sens mathématique de ce mot.

Citons par exemple :

- le choix du type de réacteur et des méthodes de mise en œuvre : l'opération peut être conduite de façon continue, discontinue, ou semi-continue; le réacteur peut fonctionner adiabatiquement, à température constante, ou selon tout mode intermédiaire

- le choix des conditions physico-chimiques : compte tenu des contraintes exercées par l'amont du procédé, il convient de déterminer en particulier l'état physique, la température, la pression et la composition du mélange réactif introduit dans le réacteur.

Ces choix fixent les conditions opératoires de la transformation chimique et influencent de façon décisive les limites potentielles de celle-ci (thermodynamique et cinétique chimiques).

### 1.7.2. Différents systèmes de refroidissement-chauffage des réacteurs

Un système de refroidissement-chauffage a pour but d'apporter ou évacuer la chaleur absorbée ou générée par la réaction (le contrôle de température). Cette surface d'échange peut être localisée à l'intérieur du réacteur (serpentin, plaques), à l'extérieur (échangeur classique sur la phase liquide ou condenseur sur la phase vapeur) ou constituer la paroi du réacteur (double enveloppe ou jaquette). Ces divers systèmes peuvent parfois être utilisés simultanément.

La surface d'échange de chaleur ( $A$ ) est choisie de telle sorte que l'apport ou l'élimination de chaleur puisse être réalisé à tout instant, la capacité d'échange  $Q$  (en watts) peut être calculée au moyen d'une formule classique :

$$Q = h \cdot A(T - T_f) \quad (2.1)$$

Où ( $Q > 0$ ) la chaleur est fournie au système) ;  $T$  est la température du milieu réactionnel;  $T_f$  est la température moyenne du fluide pour échange thermique;  $h$  et  $A$  sont le coefficient global d'échange thermique en ( $w \cdot m^{-2} \cdot k^{-1}$ ) et la surface d'échange de chaleur en  $m^2$ .

Une double enveloppe (figure 1.9.a) est relativement simple à réaliser, elle est cependant limitée en surface d'échange (de  $2,5 m^2$  par  $m^3$  pour des petits réacteurs, à  $1,5 m^2$  par  $m^3$  pour des réacteurs de  $35 m^3$ ). Par ailleurs, le coefficient global de transfert de chaleur obtenu avec une double enveloppe est relativement faible (de  $60$  à  $350 W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}$ ). Pour cette raison, on remplace souvent la double enveloppe par un serpentin constitué par un demi-tube enroulé à spires jointives à l'extérieur et soudé sur la paroi du réacteur (figure 1.9.b).

Un serpentin ou des plaques à l'intérieur du réacteur permettent aussi d'obtenir relativement bons coefficients de transfert de chaleur ( $700$  à  $800 W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}$ ), mais leur surface d'échange est limitée et leur présence peut gêner l'action de l'agitateur (figure 1.9.c).

L'échangeur externe, qu'il soit inclus dans une boucle de recirculation du liquide (figure 1.9.d) ou qu'il opère en tant que condenseur sur la phase vapeur (figure 1.9.e), est le seul système permettant d'avoir une surface d'échange élevée comme le nécessitent les réactions fortement exothermiques (polymérisations par exemple).

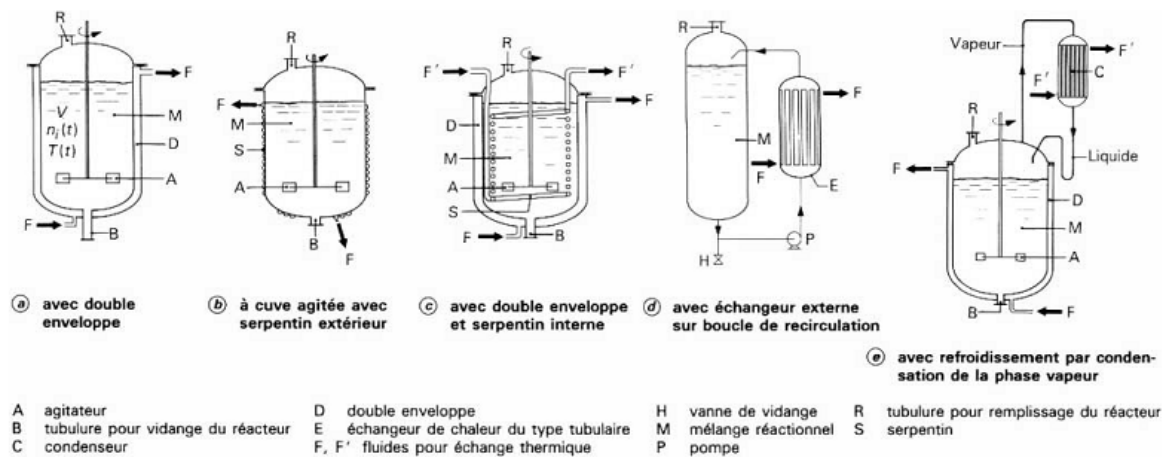


Figure 1.9 : Les différents systèmes de chauffage-refroidissement.

Le chauffage est généralement obtenu par de la vapeur d'eau, mais on peut aussi utiliser des résistances électriques, de l'eau chaude, des gaz chauds, et le refroidissement dans beaucoup d'industrie ce fait par l'eau froide.

### 1.8. Emballement thermique dans les réacteurs chimique

L'emballement thermique correspond à la perte de contrôle de la température dans d'un réacteur, contenant une substance chimique ou un milieu réactionnel. Cette évolution de la température est due à des phénomènes exothermiques tels que des transformations chimiques ou physiques. Il peut s'agir de la décomposition thermique d'une substance. L'emballement est toujours le résultat de l'élimination insuffisante de l'énergie générée dans le réacteur par ces phénomènes.

Les conséquences de la perte de contrôle de la température se traduisent par :

- l'augmentation de la vitesse des réactions chimiques,
- l'apparition de réactions indésirables qui ne se produisent pas dans les conditions normales du procédé. Le plus souvent, il s'agit de réaction de décomposition du mélange réactionnel,
- l'augmentation de la pression totale due à la vaporisation des constituants du mélange réactionnel et/ou à la production chimique de gaz incondensables.

L'augmentation de pression peut avoir de nombreuses conséquences néfastes :

- l'éclatement de l'enceinte qui s'accompagne souvent d'une émission de projectiles à une distance de plusieurs centaines de mètres,
- le déclenchement d'incendies : si le mélange réactionnel est émis à l'air libre, l'aérosol peut s'enflammer. Cette inflammation du nuage créé donne une boule de feu avec un effet de pression faible au niveau du sol,
- le déclenchement d'explosion : si le mélange réactionnel est émis dans un espace confiné bâtiment, le mélange des gaz, des gouttelettes et de l'air peut exploser. Dans ce cas, un effet de souffle important apparaît, entraînant la destruction du bâtiment et la formation d'incendie secondaires.

### **1.9. Problème général du calcul d'un réacteur**

Le calcul d'un réacteur est un problème complet qui fait intervenir simultanément tous les bilans classiques rencontrés en génie chimique :

- a) Un bilan de matière qui tient compte notamment des cinétiques de réaction et éventuellement des vitesses de transferts entre phases.
- b) Un bilan énergie ou intervient en particulier le transfert de chaleur: certains réacteurs peuvent être largement tributaires des problèmes d'apport ou d'évacuation de chaleur
- c) Un bilan quantité de mouvement qui permet notamment d'évaluer la perte de charge à travers le réacteur.
- d) Une équation d'optimisation qui indique quelle variable de profit on désire rendre maximale : production du maximum d'un produit dans le minimum de volume au meilleur compte , production horaire , rendement sélectif en un produit déterminé, etc.
- e) Une ou plusieurs équations dynamiques définissant la stabilité, les caractéristiques du régime transitoire, les possibilités de contrôle et de régulation du procédé, etc....

Lorsque ce problème se pose dans sa généralité, il n'est justiciable que d'un traitement automatique par des méthodes numériques ou des procédés de simulation, à quelques rares exceptions près.

Toutefois on pourra résoudre un grand nombre de problèmes réels en utilisant la notion de réacteur idéal.