

Chapitre 2 : Classification des réacteurs chimiques

On appelle réacteur chimique, tout appareillage dans lequel a lieu une transformation chimique, soit pour l'étudier, soit pour l'utiliser à la production de substances nouvelles. Le choix d'un type de réacteur est lié à la nature de la réaction qu'on désire y produire.

Les réacteurs peuvent être classés en deux grandes catégories :

□ **Réacteurs fermés** dans lesquels il n'y a aucun échange de matière avec le milieu extérieur.

□ **Réacteurs ouverts** dans lesquels le mélange réactionnel entre et sort en permanent

Un réacteur est donc un *système* qui peut être, comme tout autre système : ouvert, lorsqu'il peut échanger de la matière et de l'énergie avec le milieu extérieur. fermé, lorsqu'il ne peut échanger de la matière (échange d'énergie reste possible) ; isolé s'il ne peut échanger ni de la matière ni de l'énergie avec le milieu extérieur.

On peut classer les réacteurs selon différents critères dont les principaux sont:

Circulation du mélange réactionnel : le réacteur est dit fermé ou discontinu ou encore "batch" s'il n'y a ni alimentation ni évacuation des constituants et continu s'il possède à la fois des alimentations et des évacuations pour les réactifs et les produits. Dans le cas où au moins un des constituants n'est plus alimenté ou n'est plus évacué, le réacteur est dit, indifféremment, semi-fermé.

Evolution dans le temps : si l'état du système (composition, T, P, etc.) varie au cours du temps, on parle du réacteur en régime transitoire. C'est notamment, le cas des réacteurs fermés et semi-fermés. Pour les réacteurs continus, après une première phase de démarrage, toutes les grandeurs peuvent devenir indépendantes du temps ; on parle alors du fonctionnement en régime **stationnaire** ou permanent.

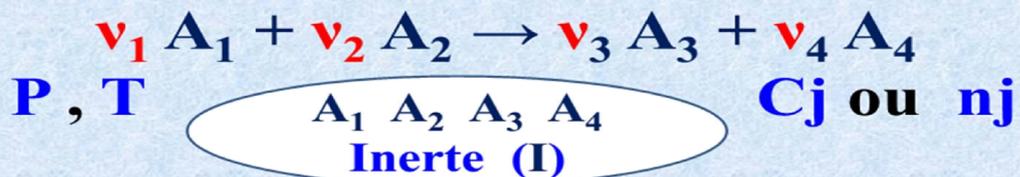
Degré de mélange : cette caractéristique, qui joue un rôle primordial sur les performances du réacteur, dépend de l'hydrodynamique de l'écoulement dans le système. Le degré de mélange dans un réacteur peut varier entre les deux cas extrêmes que sont le mélange parfait et le mélange minimal. Le premier cas peut être obtenu par une agitation dans le système dont la conséquence est de rendre identiques, en tout point et à chaque instant, toutes les caractéristiques du mélange réactionnel. En revanche, dans le deuxième cas, le mélange réactionnel est constitué de blocs n'échangeant aucune matière entre eux. Nous verrons plus loin comment ces définitions donneront naissance au concept de réacteurs dits *idéaux*.

Phase en présence : le réacteur est dit homogène ou mono-phasique si la transformation chimique se produit au sein d'une phase unique. Dans le cas contraire, il s'agit d'un réacteur hétérogène ou poly-phasique.

Marche thermique : les marches thermiques les plus fréquentes sont la marche isotherme (sans changement de température) et la marche adiabatique (sans échange de chaleur).

II- Notions importantes au calcul des réacteurs chimiques

1- Description du système réactionnel



Pour cette réaction chimique faisant intervenir **j constituants actifs** (*réactifs et produits*) appelés A_j , l'équation stœchiométrique s'écrit donc : $\sum v_j A_j = 0$

Système fermé

Dans un système fermé homogène de volume V , la composition est repérée par : **n_j** (actifs: **Réactifs ; Produits**) et **n_I** (Inerte).

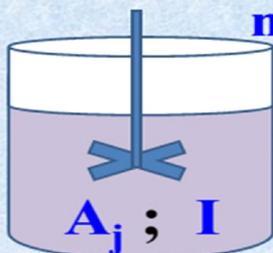
➤ Etat initial (*Etat Référence*) : $t=0$

$$n_0(\text{total}) = n_0 + n_I = \sum n_{j0} + n_I$$

➤ A un instant $t \neq 0$

$$n(\text{total}) = \sum n_j + n_I$$

$$\text{Taux d'inerte} = n_I / \sum n_{j0}$$



Paramètres d'avancement d'une réaction chimique

Soit la réaction chimique :



On définit l'avancement molaire x :

$$x = \frac{n_j - n_{j0}}{\nu_j}$$

$$n_j = n_{j0} + \nu_j x$$

□ Avancement généralisé χ

$$\chi = \frac{n_j - n_{j0}}{\nu_j n_0}$$

$$n_j = n_{j0} + \nu_j n_0 \chi$$

$$\chi \geq 0$$

□ Taux de conversion X_j

On définit le taux de conversion X_j par rapport au réactif **clé** ou **limitant**

$$X_j = \frac{n_{j0} - n_j}{n_{j0}}$$

$$n_j = n_{j0}(1 - X_j)$$

$$0 < X_j < 1$$

Système ouvert (continu)

Pour un système ouvert (ROPA ou RP) les grandeurs instantanées suivantes sont utilisées :

- le débit volumique Q (m^3/s).
- les flux molaires des actifs F_j (mole/s) et d'inerte F_I (mole/s)



$$\text{Taux d'inerte : } I = F_I/F_0 = F_I/\sum F_{j0}$$

Paramètres d'avancement



$$x^* = \frac{F_j - F_{j0}}{v_j} \quad \left(\frac{\text{mole}}{\text{s}} \right)$$

$$X = \frac{F_j - F_{j0}}{v_j F_0} \quad F_0 = \sum_j F_{j0}$$

$$F_j = F_{j0} + v_j F_0 X$$

Taux de conversion

$$X_j = \frac{F_{j0} - F_j}{F_{j0}}$$

$$F_j = F_{j0} (1 - X_j)$$

$$v_j F_0 X = - F_{j0} X_j$$

Dilatations chimique (α) et physique (β)

$$\text{Système fermé : } V = V_0 \beta (1 + \alpha \chi)$$

$$\text{Système ouvert : } Q = Q_0 \beta (1 + \alpha \chi)$$

$$\beta = \frac{P_o T}{P T_o}$$

$$\alpha = \frac{\sum v_j}{1 + I}$$

En phase liquide (généralement): $V \approx V_0$ et $Q \approx Q_0$

3- Vitesse de réaction chimique

➤ **La vitesse d'une réaction chimique** : quantité de matière transformée par unité de temps et de volume.

$$r = \frac{1}{V} \frac{1}{v_j} \frac{dn_j}{dt}$$

➤ **Expression habituelle de la vitesse d'une réaction** : loi de vitesse

$$r = k * \prod_j [A_j]^{\alpha_j} \text{ (réaction irréversible)}$$

Vitesse de transformation chimique (R_j) d'un constituant j :

R_j : la vitesse de transformation chimique du constituant j par unité de temps et par unité de volume :

$$R_j = \frac{1}{V} \frac{dn_j}{dt}$$

$$R_j = \frac{1}{V} n_0 v_j \frac{d\chi}{dt}$$

Si $v_j > 0 \Rightarrow R_j > 0 \Rightarrow$ Production

Si $v_j < 0 \Rightarrow R_j < 0 \Rightarrow$ Consommation

$R_j = v_j r$; $r > 0$ (r : toujours positive)

Tableau récapitulant les critères de classement des réacteurs :

CRITERES	CARACTERISTIQUE
Circulation du mélange réactionnel	Discontinu (ou fermé) Semi-continu (ou semi-fermé) Continu (ou ouvert)
Evolution dans le temps	Régime transitoire (opération discontinue ou démarrage ou arrêt) Régime permanent (marche continue des réacteurs ouverts)
Degré de mélange	Réacteur parfaitement mélangé (RPM) (concentrations et température uniformes) Réacteur piston (RP) (progression de la charge sans mélange)

