

Stage LIESSE « Réacteurs industriels continus »

ENSIACET – du 9 au 11 mai 2022

Auteurs du CR : Jean-Michel GARROT

/ Contexte

L'ENSIACET a proposé du 09 au 11 mai 2022 un stage intitulé « Réacteurs industriels continus » qui s'est tenu sur le campus de l'école, à Toulouse. Nous étions une vingtaine d'enseignants de CPGE à y participer.

Christophe Gourdon, professeur émérite et principal organisateur du stage, nous a accueillis avec enthousiasme dès 8h30 avant de laisser la parole à Xûan Meyer, enseignante-chercheur et directrice adjointe, qui nous a présenté l'Ecole et les formations qui y sont dispensées, déclinées en 5 spécialités diplômantes visant à former « des ingénieurs-citoyens du monde [...] pour accompagner les transformations écologiques, énergétiques, économiques et industrielles ».

/ Lundi 9 mai

La première journée est consacrée aux procédés industriels. Michel Meyer nous introduit dans la problématique par la représentation d'une installation industrielle sous forme de « flowsheet » (= schéma de procédé) dont l'analyse fonctionnelle fait émerger les opérations unitaires. Il présente alors la modélisation d'un réacteur et la formule en termes de bilans de matière et d'énergie. Il insiste sur la nécessité de faire un bilan global (incluant en particulier le flux de recyclage, avec ou sans purge) pour déterminer le flux d'entrée. Il apparaît alors une difficulté de notation de certaines grandeurs chimiques habituelles adaptées aux réacteurs ouverts, telles que l'avancement de la réaction exprimé en mol.s⁻¹ ; c'est pourquoi l'utilisation des taux de conversion est recommandée. Sont alors discutés les avantages et inconvénients du possible excès d'un des réactifs, ainsi que l'introduction d'un inerte. Une telle analyse de sensibilité ouvre la voie à l'optimisation des paramètres opératoires pour laquelle l'outil numérique est recommandé. Ces propos sont ensuite illustrés dans le cas de la production du chlorure de vinyle sous la forme de correction d'un TD.

Après nous être restaurés, Patrick Cognet entreprend l'étude des réacteurs idéaux et de leur pertinence, avec pour objectif principal le dimensionnement du réacteur une fois fixés le taux de conversion et la sélectivité escomptés. Outre les questions du régime (isotherme / adiabatique / avec échange thermique modulé), et du lit catalytique (fixe / fluidisé / circulant) se pose pour un réacteur ouvert la question du contrôle du mélange (après admission du mélange homogène des réactifs) supposé total dans un RAC (= Réacteur parfaitement Agité Continu) et nul dans un RP (= Réacteur Piston). Dans le cas de ces deux réacteurs idéaux sont alors posés les bilans de matière et menés les calculs de cinétique afin d'obtenir pour chacun l'expression du temps de passage (et donc du volume adapté). Les calculs sont menés en phase gazeuse avec variation du débit volumique induite par les dilatations physique ou chimique, ce qui sort du cadre des programmes de CPGE. Il est toutefois facile de simplifier ces relations pour se ramener aux cas à débit volumique constant, imposés par le programme.

La journée se termine par une visite rapide de la médiathèque et surtout des laboratoires où de grandes installations fascinent nos regards. Christophe Gourdon nous présente finalement avec fierté les nouveaux réacteurs « plaques » en carbure de silicium (SiC !) où le mélange réactionnel circule en zigzag dans des canaux millimétriques avec une hydrodynamique de type piston et sous un excellent contrôle en température : une prouesse !

/ Mardi 10 mai

La matinée du deuxième jour permet à Patrick Cognet de poursuivre son exposé sur les réacteurs idéaux. En reprenant les expressions des temps de passage obtenues la veille, il compare les performances du RAC et du RP, puis aborde l'association de réacteurs, en série ou en parallèle, ce qui permet une meilleure modélisation des réacteurs réels. Sont enfin abordés les bilans thermiques afin d'optimiser la température du réacteur. Dans le cas d'une réaction exothermique en réacteur piston se pose la question d'une température de compromis pour un taux de réaction donné, et donc la mise en œuvre d'une progression optimale en température. Dans le cas d'un fonctionnement adiabatique se pose la question du choix de la température d'entrée pour l'obtention d'un taux de réaction donné, puis la question du mode de refroidissement conducto-convectif. À l'aide d'un diagramme de Semenov peut alors être définie une zone d'opération sûre pour un fonctionnement stable du réacteur.

Durant l'après-midi, Anne-Marie Billet nous a encadrés de près et avec beaucoup de bienveillance pour un TD-TP d'informatique sous Python visant à dimensionner un réacteur industriel d'oxydation du méthanol. Suite à quoi, Carine Julcour nous présente l'intérêt d'outils de modélisation CFD (Computational Fluid Dynamics) tels que Comsol pour obtenir une description fine des écoulements par intégration numérique des équations différentielles de Navier-Stokes et de transport. Il est ainsi possible de « visualiser » les écarts à l'écoulement piston idéal, tels que la dispersion axiale, et de calculer avec précision la concentration moyenne convectée mesurée en sortie de réacteur par l'expérimentateur.

Ce deuxième jour s'achève par un moment de convivialité dans la salle d'expérimentation ouverte aux étudiants : l'AIGEP. Cet atelier interuniversitaire comprend 24 installations correspondant à des opérations unitaires classiques qui permettent aux étudiants de se familiariser avec le pilotage d'un procédé industriel. Depuis 2016, 8 à 9 d'entre eux peuvent d'ailleurs être utilisés à distance via un weblab.

On consultera avec profit le site <https://www.aigep.fr> !

/ Mercredi 11 mai

La matinée du 3ème jour permet à Anne-Marie Billet et Carine Julcour d'élargir la présentation aux réacteurs réels. Pour estimer le degré de « mélange » dans le réacteur, Anne-Marie Billet nous introduit la DST, fonction de « distribution des temps de séjour » notée $E(t)$. Cette DST est suffisamment caractéristique d'un réacteur pour servir de critère de modélisation d'un réacteur réel par l'association de plusieurs RAC en série, ou bien par un RP « piston-dispersion » (= RP dans lequel on introduit de la dispersion axiale). La modélisation sera ainsi d'autant plus fidèle que sa DST sera proche de celle du réacteur réel, au moins en termes de moyenne et de variance des temps de séjour. Carine Julcour élargit encore le sujet en s'intéressant à l'optimisation d'un catalyseur supporté dans le cas d'une réaction catalytique fluide-solide. Les mécanismes sont analogues à ceux de la catalyse hétérogène d'hydrogénation des alcènes, et la diffusion des espèces vers la surface active du catalyseur (qu'elle soit périphérique ou interne aux pores) est analogue à celle rencontrée dans la couche de diffusion d'une électrode électrochimique.

/ Conclusion et remerciements

Christophe Gourdon et Xûan Meyer concluent ces trois journées très appréciées par l'ensemble des participants. L'objectif de présenter les concepts de chimie des procédés industriels exigés par les futurs programmes de chimie de CPGE est atteint. Ils écoutent nos préoccupations et nos attentes et se mettent à notre disposition pour de plus amples informations et appellent de leurs vœux un partenariat ENSIACET-CPGE.

Nous remercions alors tous les organisateurs et intervenants pour la très grande qualité de ce stage. Tous les documents nous sont remis au format numérique et seront communiqués incessamment à tous par l'UPS.

Jean-Michel Garrot, professeur de chimie en spé PC au lycée Saliège (31130 Balma)