

Les méthodes du génie chimique (1^{re} partie)

par Pierre Le Goff

(Professeur de génie chimique, E.N.S.I.C.-I.N.P. de Nancy; Directeur du Centre de cinétique physique et chimique du C.N.R.S.)

Le génie chimique est l'ensemble des méthodes et des techniques utilisées par les inGÉNIEurs dans l'industrie chimique. Le génie chimique est donc la méthodologie et la technologie de l'industrie chimique.

Pour bien souligner la différence entre méthodologie chimique, technologie chimique et chimie industrielle, considérons l'exemple de deux procédés apparemment aussi différents que la fabrication du carbonate de soude, qui se compte en milliers de tonnes par jour et celle d'un antibiotique qui se compte en kilogrammes par jour. Dans les deux procédés, on trouve des techniques très analogues par exemple l'évaporation des solvants, la filtration et le séchage des solides granulés, etc... La méthodologie chimique s'occupe des séchoirs, des filtres et des évaporateurs, du point de vue de leur principe, de leur conception et de leur fonctionnement optimal. La technologie chimique s'occupe de la réalisation de ces appareils, de leur structure mécanique et de leurs matériaux de construction. La chimie industrielle s'occupe des procédés chimiques dans lesquels ces appareils sont utilisés.

Quelles sont les méthodes du génie chimique ? Créées essentiellement par et pour l'industrie du pétrole, comment s'étendent-elles maintenant aux autres industries ? Comment pratiquement les applique-t-on à toute opération de transformation de la matière ? Telles sont les questions auxquelles nous nous proposons de répondre.

I. Un peu d'histoire

I.1. Les unités d'opération

C'est vers 1915-1920 qu'un groupe de professeurs et d'universitaires américains reconnut que tout procédé industriel peut se ramener à une combinaison d'un nombre restreint d'unités d'opérations (physiques) (unit operations) telles que broyage, distillation, absorption, séchage, etc...

La première publication de cette nouvelle présentation de l'industrie chimique fut l'ouvrage « Principles of Chemical Engineering » publié en 1923 au M.I.T. C'est

l'enseignement de cet ensemble d'opérations physiques qui constituait la base de la formation du « Chemical Engineer » américain. Les Canadiens de langue française, qui assistaient à cette évolution des méthodes pédagogiques nord-américaines, inventèrent alors la locution « génie chimique » pour traduire « chemical engineering » par analogie avec les autres formes de génie : génie civil, génie maritime, génie rural, génie militaire, etc...

On reconnut rapidement que ces opérations « unitaires » de nature physique se classaient en trois grands groupes. Ces groupes sont donnés dans le tableau I :

un premier groupe concerne tous les écoulements de fluides dans les tuyauteries. L'industrie chimique utilise de nombreux fluides ayant des propriétés très particulières, par exemple les verres fondus et les matières plastiques que l'on fait « couler » à travers des extrudeuses, des moules, etc..., les émulsions, mousses, brouillards que l'on veut produire, détruire ou stabiliser, etc..., les milieux poreux que l'on veut colmater ou décolmater, etc...;

un deuxième groupe concerne les solides granulés. Quand la surface par unité de volume de solide devient très grande, les propriétés surfaciques de la matière l'emportent sur ses propriétés volumiques. Ces opérations concernent donc la création de ces nouvelles surfaces (exemple : broyage) qui consomme beaucoup d'énergie, les interactions de ces grains avec les fluides dans lesquels ils sont dispersés et les interactions des grains les uns avec les autres ;

un troisième groupe concerne les transferts de matière et/ou de chaleur entre phases. Il y a pratiquement quatre cas à considérer selon que les phases en contact sont solides, liquides ou gazeuses. On distinguera ensuite les cas où un seul soluté est transféré d'une phase à l'autre, des cas où plusieurs solutés sont transférés sélectivement en vue de leur fractionnement. On distinguera enfin les cas où ces transferts de matière sont ou ne sont pas accompagnés d'un fort transfert de chaleur.

Tableau I.

1. Opérations de mécanique des fluides

Écoulements de fluides « normaux » : stockage, mesurage, pompage. Détente de gaz à haute pression. Écoulements sous vide et haut vide. Fluides *non-newtoniens* (verres et matières plastiques). Fluides *diphasés* : production, transport, coalescence, dévésiculage des émulsions, mousses, brouillards.

2. Opérations sur les solides granulés

Comminution, broyage. Séparation des solides : tamisage, sédimentation, filtration. Entraînement des solides par les fluides : fluidisation, élutriation, transport pneumatique, transport hydraulique, flottation. Agglomération, frittage.

3. Opérations de transfert de matière et/ou de chaleur

Entre vapeur et liquide : évaporation, condensation, distillation, absorption, humidification. Entre liquide et solide : cristallisation, fusion, dissolution, lavage, adsorption, échange d'ions. Entre vapeur et solide : sublimation, séchage, lyophilisation. Entre liquides immiscibles : extraction.

4. Opérations de transformations chimiques

Réactions classées selon : la nature des phases réactives ; la stœchiométrie ; l'écart à l'équilibre ; la thermicité ; le mécanisme réactionnel.

I.2. Cinétique physique et réacteurs chimiques

A partir de 1950, l'effort d'abstraction et de synthèse qui caractérise le génie chimique a conduit les auteurs

à ramener toutes ces opérations à quelques concepts plus simples encore : les phénomènes de transport (par diffusion et par turbulence) de la matière, de la chaleur et de la quantité de mouvement, au sein des phases et entre les phases : c'est la *cinétique physique*.

On a d'autre part été amené à considérer un 4^e groupe d'opérations, celles qui impliquent des *transformations chimiques*. Ces réactions chimiques peuvent être classées suivant divers critères, comme le montre le tableau I, en distinguant par exemple : les réactions homogènes (en volume) et hétérogènes (aux interfaces), la stœchiométrie (réactions uniques, multiples, en séquence, en parallèle, ...), les réactions irréversibles et réversibles (au voisinage d'un équilibre chimique), les réactions exo- et endo-thermiques, le mécanisme réactionnel (par stades ou en chaîne, ionique ou radicalaire...).

Le fait important est que, dans un réacteur industriel, les réactions chimiques ne sont jamais isolées ; elles se trouvent toujours en compétition avec des phénomènes physiques tels que l'apport par diffusion et par turbulence des substances qui vont réagir, le mélangeage de ces substances, l'évacuation de la chaleur de réaction par conduction et par rayonnement, etc...

C'est à partir de 1960 que s'est développé le « génie de la réaction chimique » qui a pour objectif de prendre en compte tous ces phénomènes qui interviennent simultanément dans les réacteurs industriels.

En conclusion, au cours de ses cinquante années d'existence, le génie chimique a beaucoup évolué. Au cours de la dernière décennie, de nouveaux concepts encore plus généraux ont été introduits. Mais il n'est pas nécessaire d'en suivre l'évolution chronologique.

Passons directement à la description de la méthodologie utilisée en 1974.

II. La science des systèmes

La notion de « système » s'est imposée en science et surtout en technologie au cours de ces 20 dernières années. Qu'est-ce qu'un « système » ? Selon une définition très générale, c'est un « ensemble d'éléments, matériels ou non, reliés entre eux selon une loi de la nature ou selon un plan établi à l'avance, en fonction d'un but à atteindre ».

Avec cette définition, tout n'est que « systèmes » et il est certain que la science des systèmes cherche à rendre compte des fluctuations de fonctionnement de systèmes aussi variés qu'une colonne de distillation, l'engorgement des autoroutes, les actions cotées en bourse, les organismes vivants, ou même l'évolution de toute notre civilisation au cours des prochaines années...

Nous ne considérerons ci-après que les systèmes constitués par des opérations industrielles et nous envisageons successivement deux problèmes : le problème « externe », c'est-à-dire les relations de ce système avec le monde extérieur ;

le problème « interne », c'est-à-dire la structure interne et l'organisation des éléments qui le composent.

II.1. La dynamique externe

II.1.1. L'opération est une « boîte noire »

Toute opération industrielle, quelle que soit sa nature, peut être assimilée à une « boîte noire », dont on se refuse à étudier la structure interne, et que l'on considère seulement comme un procédé de traitement de grandeurs d'entrées, pour délivrer des grandeurs de sorties (figure 1).

Il convient de noter que cette « boîte noire » peut représenter des opérations à diverses échelles, par exemple : un appareil ou une machine dans un atelier (réacteur,

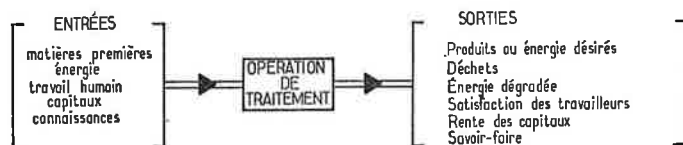


Figure 1.

presse à emboutir, métier à tisser, véhicule de transport et stockage, etc...);
 tout l'atelier comprenant un grand nombre de machines;
 toute l'usine comprenant plusieurs ateliers;
 tout un enchaînement « vertical » d'usines intégrées.

Cette boîte noire peut être considérée de différents points de vue :

c'est un transformateur de matière et/ou d'énergie :
 à partir de matières premières et d'énergie utilisable, elle fabrique des « produits » plus élaborés, mieux adaptés aux besoins, et elle donne en sous-produits, des déchets polluants et de l'énergie dégradée;

c'est une opération sociale : elle procure aux opérateurs humains de la satisfaction (salaires, plaisir du travail bien fait...) en échange de leur travail (intellectuel et manuel);

c'est un placement de « capitaux », producteur d'une rente. Nous entendons par « capitaux » l'ensemble des « moyens » mis à la disposition des opérateurs. Ces « moyens » ne sont pas seulement financiers, mais surtout matériels, comme nous le verrons plus loin;

c'est un système créateur d'information. Il utilise des connaissances scientifiques et techniques (achats de brevets) et il crée de nouvelles connaissances et du « savoir-faire ».

Ces quatre points de vue ont plus ou moins d'importance selon la nature de l'opération concernée. Mais quelle que soit l'opération, l'ingénieur qui est responsable de son fonctionnement, aura pour tâche essentielle de *maximiser* une certaine fonction-objectif. C'est un problème d'optimisation.

II.1.2. La science de l'optimisation est une des sciences de base du génie chimique

Jusqu'aux années 1965-1970, c'était le profit de l'opération que l'on cherchait à maximiser. Il s'agissait de parvenir au but fixé, par exemple produire une quantité donnée de produits ayant des propriétés données, avec la plus faible consommation possible des six grandeurs coûteuses : matières premières, énergie, travail humain, connaissances (brevets), capitaux et temps (amortissement des capitaux).

Pour établir l'expression mathématique de la « fonction-objectif », on utilise les formules de prix, c'est-à-dire les relations permettant d'exprimer dans une seule unité, l'unité « monétaire » toutes les quantités de ces six grandeurs coûteuses consommées.

L'optimum est alors obtenu en annulant les dérivées partielles de cette fonction-objectif par rapport à chacune des 6 grandeurs coûteuses. (Remarquons que, dans la pratique, ce principe général d'optimisation est souvent remplacé par des règles plus simples à appliquer : maximisation d'un rendement horaire, d'une sélectivité, etc...)

Au cours de la dernière décennie, il est apparu que la fonction à maximiser n'est pas seulement le profit, mais une grandeur plus complexe caractérisant la qualité de la vie des hommes concernés par le procédé : ce n'est pas seulement la quantité de travail humain qui intervient, mais aussi sa qualité (densité d'effort physique, répétition des tâches, responsabilité individuelle, etc...);

d'autre part, le procédé est une source de nuisances, non seulement pour les opérateurs du procédé, mais aussi pour de nombreux humains du voisinage.

Il faut donc considérer désormais qu'une autre grandeur est « consommée », la santé (physique, intellectuelle, morale) et il faudra évaluer le « prix » de cette santé consommée (comme les compagnies d'assurance comptabilisent le prix de la vie d'un homme). Ce coût de la santé consommée constituera donc un septième terme dans l'expression générale de la fonction-objectif.

La grandeur à maximiser change de nature : ce n'est plus le profit de l'opération, mais le bien-être matériel moyen de tous les opérateurs.

Enfin, tout récemment un nouveau facteur apparaît, celui de la limitation des ressources naturelles (énergie, aliments, métaux...). Ce facteur n'aura ici pour conséquence que de changer les valeurs numériques de certains coefficients; en effet, en société de libre-échange, la rareté d'un produit entraînera une augmentation de son prix et en société dirigiste, à prix taxés, l'ingénieur affectera le produit d'un « coefficient de rareté » qui interviendra dans l'équation d'optimisation de la même manière qu'une formule de prix.

En conclusion, la science de l'optimisation est et restera l'une des sciences de base de l'ingénieur des procédés. Des changements d'objectifs aussi importants que ceux intervenus au cours de la dernière décennie provoquent des bouleversements industriels car les solutions qui étaient optimales ne le sont plus et inversement. Mais les méthodes d'optimisation ne changent pas : ces bouleversements économiques ne se traduisent que par des changements de valeurs numériques de quelques coefficients dans des équations.

II.1.3. Les bilans d'extensités : matière, énergie, information + entropie

Le système est traversé par des flux de diverses « extensités ». Ce terme, emprunté à la thermodynamique, désigne toutes les grandeurs *mesurables* qui entrent et/ou qui sortent du système, et qui sont de nature matérielle, énergétique ou informationnelle.

La première équation que tout ingénieur pose, pour décrire le fonctionnement d'un système ouvert (fig. 2) est le *bilan* de chaque extensité, sous la forme suivante :

$$\left(\text{flux} \right)_{\text{entrant}} - \left(\text{flux} \right)_{\text{sortant}} = \left(\text{débit de} \right)_{\text{consommation}} + \left(\text{débit} \right)_{\text{d'accumulation}}$$

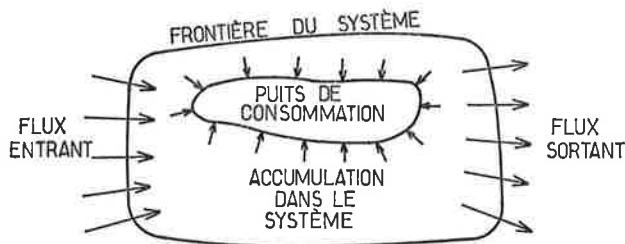


Figure 2.

A titre d'exemple, la figure 3 représente un gazogène constitué d'un empilement de grains de coke, traversé par un courant d'air. La combustion du coke donne un mélange de CO et de CO₂. Le but de l'appareil est de produire un gaz combustible contenant la plus forte concentration possible de monoxyde CO. On écrit d'abord les bilans *totaux*, c'est-à-dire la conservation de la matière et de l'énergie, quelles que soient leurs formes.

On écrit ensuite les bilans *partiels*, pour chaque espèce chimique et pour chaque forme d'énergie : thermique, mécanique, chimique, etc...

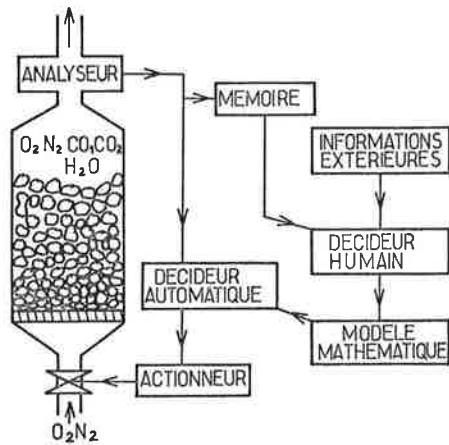


Figure 3.

Au cours de la dernière décennie, de grands progrès ont été accomplis en traitant l'information, comme une extensité, qui se crée, qui se transporte, qui se stocke... comme la matière et l'énergie. On dresse alors le bilan de l'extensité-information dans chaque système.

L'apport d'information à un système a très souvent pour but d'augmenter son « organisation » interne, de compliquer sa « structure », c'est-à-dire encore de diminuer son entropie. Les théories modernes des systèmes industriels, actuellement en plein développement, cherchent à y établir des bilans « entropiques globaux », en tenant compte des flux d'information (assimilée à de la « néguentropie »). Ces recherches sont très proches, formellement, de celles des biologistes qui appliquent la thermodynamique des phénomènes irréversibles au « fonctionnement » des organismes vivants.

Nous ne considérerons ci-après qu'un cas particulier, celui des systèmes ayant une structure interne fixe, indéformable, par exemple le gazogène de la figure 3, pendant une courte durée. Le bilan d'information sur le système, assimilé à une boîte noire, ne comprend que les grandeurs de sortie (ce sont toutes les mesures de pressions, concentrations, débits, températures) et les grandeurs d'entrée (ce sont toutes les commandes de débits de matière et d'énergie...).

11.1.4. Identification. Modélisation « externe »

Études de plus près l'inventaire des informations qui entrent et qui sortent d'un tel système assimilé à une boîte noire.

Les grandeurs de sortie (les mesures) sont toutes celles qui caractérisent l'état du système.

Les grandeurs d'entrée (les commandes) sont toutes celles qui influent sur cet état.

Un cas particulier, très important pratiquement, est celui où toutes ces grandeurs seraient constantes dans le temps. On dit alors que le système fonctionnerait en régime stationnaire. En fait ce cas particulier n'existe jamais en toute rigueur, d'abord parce que chaque grandeur subit sans cesse des fluctuations autour d'une valeur moyenne, et ensuite parce que cette valeur moyenne évolue elle-même, en fonction du temps, ne serait-ce que par l'usure des appareillages.

Mais l'expérience montre que très souvent cette évolution est suffisamment lente, en comparaison de la rapidité des fluctuations, pour que l'on puisse définir un régime pseudo-stationnaire de fonctionnement.

L'identification d'un système consiste à déterminer les relations de cause à effet entre grandeurs d'entrée et grandeurs de sortie. Pratiquement deux problèmes distincts se posent comme suit :

a) D'une part l'identification *statique*, c'est-à-dire la recherche des relations entre valeurs stationnaires des grandeurs d'entrée et de sortie, étant entendu que ces grandeurs peuvent varier dans de larges domaines mais suffisamment lentement.

Pour déterminer les relations entre grandeurs d'entrée et de sortie, si on ne connaît rien *a priori* sur la structure interne du système, il est nécessaire de faire des expériences sur le système *réel*, c'est-à-dire varier successivement chaque grandeur d'entrée, en laissant toutes les autres constantes et mesurer l'effet sur chaque grandeur de sortie. Les résultats de toutes ces expériences sont alors exploités statistiquement et « synthétisés » en quelques relations mathématiques empiriques.

Ces relations entre valeurs stationnaires constituent les équations d'état du système.

Un exemple : la colonne de distillation fractionnée, fonctionnant en continu. Les variables d'état sont les débits, compositions et températures des divers flux de matière entrant et sortant, ainsi que les flux de chaleur (figure 4 ci-dessous). Les « équations d'état » sont les relations entre ces grandeurs.

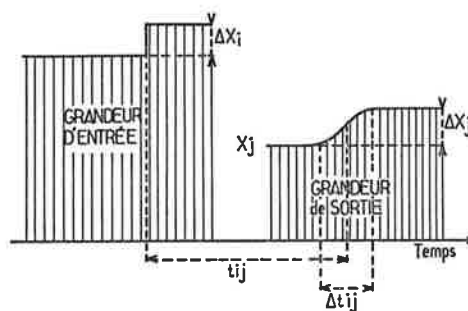
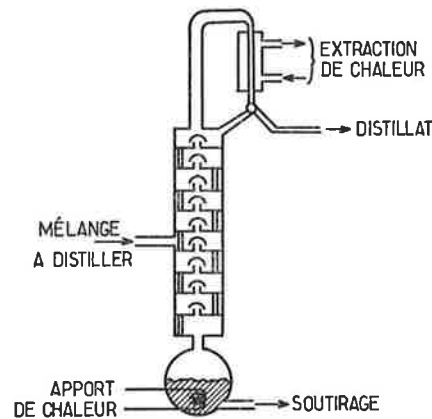


Figure 4.

b) D'autre part, l'identification *dynamique*, c'est-à-dire la recherche des relations entre petites variations rapides (fluctuations) des grandeurs d'entrée et de sortie, autour de leurs valeurs stationnaires. Ces relations sont à la base même du problème de la régulation automatique du système : comment le système réagit-il à une perturbation, provoquée ou spontanée, d'une grandeur d'entrée ? Atteint-il un nouvel état stationnaire voisin ? Cet état est-il stable ? Comment l'atteint-il, directement ou après plusieurs oscillations ?...

Ici encore, si on ne connaît rien sur la structure interne du système, il faut faire des expériences sur le système réel. On cherche toujours à rassembler les résultats

de ces expériences sous une forme mathématique aussi simple que possible. Le « modèle » mathématique le plus simple est le : *modèle linéaire*, qui consiste à postuler que la variation de chacune des n grandeurs de sortie est proportionnelle à la variation de chacune des m grandeurs d'entrée, et que toutes ces variations sont additives. Le modèle mathématique est donc simplement constitué par la matrice des $(n.m)$ coefficients de proportionnalité.

Par exemple, dans la colonne de distillation, on changera légèrement le titre molaire x_i de l'un des constituants de l'alimentation. On mesurera le nouveau titre x_j de chaque constituant dans le distillat et dans le soutirage, avec la relation :

$$\Delta x_j = k_{ij} \cdot \Delta x_i$$

La matrice $[k_{ij}]$ constitue le modèle de type « Boîte Noire », le plus simple que l'on puisse imaginer. Pour obtenir un modèle plus renseigné, on mesurera en outre les « retards moyens » t_{ij} , c'est-à-dire le temps écoulé entre la perturbation d'entrée et chaque perturbation de sortie. On pourra de plus mesurer l'étalement Δt_{ij} de chaque perturbation-échelon, etc...

II.1.5. Les systèmes chimiques et leur non-linéarité

La dynamique des systèmes linéaires est une science bien établie depuis longtemps, qui rend de très grands services pour l'automatisation des systèmes mécaniques, électriques, hydrauliques, etc... mais qui est nettement insuffisante en génie chimique.

Les systèmes chimiques sont en effet souvent très éloignés de la linéarité, du fait notamment de la relation exponentielle d'Arrhenius, des réactions en chaînes ramifiées provoquant des emballements et des explosions, des couplages des phénomènes thermiques et chimiques (auto-allumage), etc...

De plus il apparaît souvent des relations aléatoires (et non plus déterministes) entre les entrées et les sorties, dues par exemple à des réactions entre « paquets » de fluides partiellement mélangés au cours de leur traversée d'un réacteur.

C'est pourquoi la dynamique des systèmes chimiques est une science de pointe, en plein développement.

Mais on conçoit immédiatement que cette science ne peut pas se contenter de modèles purement régressifs, basés sur la notion de « boîte noire ». Elle ne peut progresser que par une connaissance approfondie de la structure interne, c'est-à-dire d'une part de l'organisation statique et dynamique des sous-systèmes interconnectés, qui le constituent, et d'autre part de la nature physique chimique, thermique, mécanique de chacun de ces sous-systèmes.

Nous examinerons successivement ces divers aspects.

II.2. Structure et dynamique interne

II.2.1. Modélisation interne. Les 3 principales échelles

On peut imaginer *a priori* plusieurs infinités de manières de découper un système en sous-systèmes : ces sous-systèmes sont interconnectés par plusieurs réseaux de transport des diverses extensivités : matière, énergies, informations. Si le « système » représente toute une usine, ces réseaux sont ceux des canalisations de fluides, des lignes électriques, téléphoniques, etc... entre les divers appareils (figure 5).

Si le système est un appareil donné, on peut distinguer plusieurs échelles pour les sous-systèmes : par exemple, la colonne de distillation sera d'abord considérée comme un empilement de « plateaux » dont chacun transfère des flux de vapeur et de liquide aux plateaux voisins. Ensuite chaque plateau sera

lui-même considéré comme un système, composé d'un essaim de bulles de vapeur, échangeant de la matière avec le liquide. Puis chaque bulle sera elle-même un système composé d'une surface, d'une couche-limite diffusionnelle, d'un « noyau » plus ou moins mélangé, etc... Cette dissection pourra être poursuivie jusqu'à l'échelle moléculaire et même au-delà.

Pratiquement, le génie chimique étudie la structure interne des appareils à trois échelles principales : l'échelle des appareils eux-mêmes, qui est aussi l'*échelle humaine* : nous parlerons alors de macrostructure ; l'*échelle moléculaire*, qui est celle des systèmes de dimensions comprises entre un angström et quelques centaines d'angströms ; une échelle intermédiaire, que nous proposons d'appeler *échelle capillaire*, et qui concerne tous les milieux poreux et dispersés (pores, gouttes, bulles, grains, agrégats, etc...) nous parlerons dans ces deux cas de microstructures (voir plus loin).

II.2.2. La recherche des modèles « simplissimes »

Quelle que soit l'échelle étudiée, le chercheur ou l'ingénieur se propose d'établir des modèles mathématiques, aussi simples que possible d'abord pour *décrire la structure* du système, c'est-à-dire sa forme géométrique, ses dimensions, la nature et le nombre de connections avec les systèmes homologues voisins... ;

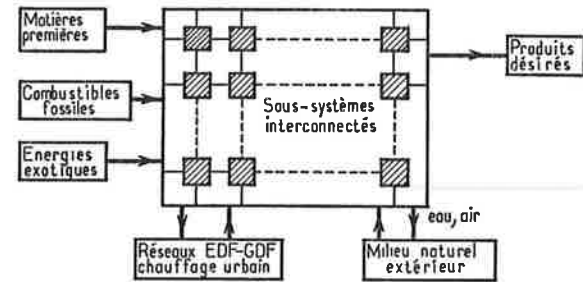


Figure 5.

Un exemple de structure de « grand » système industriel : un complexe pétrochimique moderne composé d'un ensemble de bloc-unités (usines, opérations, etc...) interconnectés par des réseaux de conduites où circulent les extensivités : matières, énergies, informations. Il n'y a pratiquement plus de « déchets » ni d'énergie dégradée sortant du système, mais uniquement des échanges de matières non-polluantes (eau, air, CO₂ ...) avec le milieu naturel extérieur et d'énergie avec les autres systèmes artificiels (réseaux E.D.F., G.D.F., chauffage urbain...).

ensuite pour *simuler et prévoir* le comportement du système sous l'influence d'une perturbation extérieure quelconque. Autrement dit, les relations de cause à effet entre grandeurs d'entrée et de sortie doivent être les mêmes dans le modèle et dans le système réel.

L'expérience montre que, jusqu'à présent, la préoccupation incessante des chercheurs a été de découvrir des modèles qui, à « qualité » égale de modélisation, soient définis par le plus petit nombre possible de paramètres. Une structure ou une relation entrée/sortie sera, si possible représentée par un seul paramètre, parfois deux, ou même trois. Par exemple une distribution quelconque sera très souvent représentée par sa valeur moyenne et son écart-type (même si elle n'est pas gaussienne!), un objet de forme quelconque sera représenté par son ellipsoïde « équivalent », et même souvent seulement par sa sphère équivalente ! etc... Nous proposons d'appeler modèles « simplissimes », ces modèles qui résultent des efforts de simplification maximale, déployés par les chercheurs pendant de nombreuses années. Les possibilités, quasi-infinies de

calcul, offertes par les ordinateurs, permettent désormais aux chercheurs de proposer des modèles de plus en plus raffinés définis par de nombreux paramètres. Mais ces modèles, satisfaisant pour l'esprit, ne sont guère utilisés par les praticiens, les modèles simplissimes suffisent très souvent, malgré leur faible précision. Par exemple une boutade classique parmi les ingénieurs qui calculent des réacteurs chimiques consiste à dire qu'en raison des nombreuses causes extérieures d'imprécision (impuretés, température et pression mal définies, ...), il est inutile de chercher une expression raffinée de la loi cinétique de vitesse de réaction, on peut souvent se contenter de postuler que toutes les réactions chimiques sont du 1^{er} ordre!... Les paragraphes suivants présentent les principaux modèles simplissimes utilisés, pour chacune des trois échelles : humaine, moléculaire et capillaire.

III. Structure et dynamique d'un réacteur

Occupons-nous d'abord de la macrostructure des appareils, c'est-à-dire de leur structure, à leur échelle même. Dans ces conditions, les fluides qui traversent ces appareils seront traités comme des phases rigoureusement continues, même s'il s'agit d'émulsions de brouillards, ou de solides pulvérulents. Pour fixer les idées et raisonner sur des cas concrets, nous ne traiterons que deux exemples, celui du réacteur de traitement d'un fluide unique, s'écoulant à flux constant, puis celui de l'échangeur de matière entre deux phases en contact.

III.1. Le réacteur de traitement d'un fluide unique

Le « fluide » séjourne dans une enceinte (un « réacteur ») où il subira un « traitement » (par exemple un échauffement, une réaction chimique, un broyage, un séchage, etc...). Il est évident que le temps de séjour t du fluide dans l'enceinte joue un rôle fondamental. Or, le mode opératoire peut varier entre les 3 cas extrêmes suivants :

III.1.1. Le tube à écoulement piston

Toutes les molécules du fluide traversent le réacteur à la même vitesse et elles y séjournent donc le même temps t (figure 6). C'est par exemple le cas d'une poudre qui traverse un four de séchage, portée par une bande transporteuse.

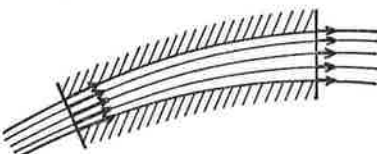


Figure 6.

III.2.1. La cuve ∞ -mélangée à alimentation continue

La composition interne est maintenue uniforme dans tout le volume par une agitation très intense. On dit que la cuve est parfaitement ou « infiniment bien mélangée » (figure 7). Ceci signifie qu'aussitôt qu'une molécule est entrée dans la cuve, elle a autant de probabilité d'en sortir que n'importe quelle autre molécule qui séjourne depuis très longtemps dans la cuve. Il existe donc dans ce type de réacteur toute une distribution de temps de séjour (D.T.S.) allant de zéro à l'infini. On montre que si le réacteur est parfaitement bien mélangé, la courbe de distribution des temps de séjour est une exponentielle (voir figure 10). La valeur moyenne (appelée « temps de passage ») est :

$\tau = \frac{V}{Q}$ où V est le volume du réacteur et Q le débit volumique de fluide (figure 9).

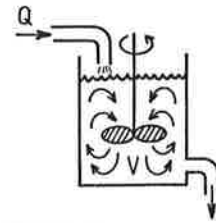


Figure 7.

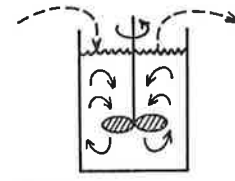


Figure 8.

III.1.3. La cuve ∞ -mélangée à alimentation périodique

La même cuve n'est plus alimentée en continu par un débit Q , mais elle est périodiquement remplie et vidée rapidement (figure 8). Si le temps de remplissage et le temps de vidage sont négligeables en comparaison de la durée t de l'opération, toutes les molécules auront le même temps de séjour dans la cuve. On peut choisir pour t la valeur τ , de sorte que le débit moyen est encore égal à Q (figure 9).

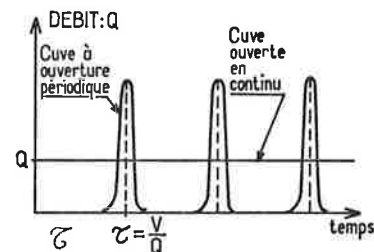


Figure 9.

On dit que dans les 2 premiers cas, le réacteur est « ouvert » en continu, alors que dans le 3^e cas, il est « fermé » pendant la réaction.

La courbe de D.T.S. a donc 2 cas extrêmes : l'exponentielle et la fonction δ de Dirac pour la même valeur moyenne τ (voir figure 10).

Molécules ayant un temps de séjour entre t et $t+dt$

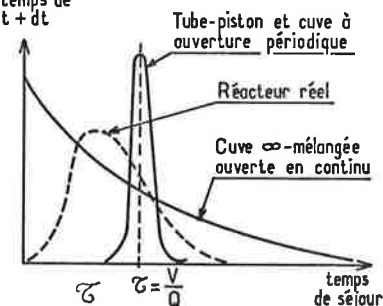


Figure 10.

Un réacteur *réel*, qui n'est pas infiniment bien mélangé, mais seulement mélangé en partie, est caractérisé par une courbe de DTS intermédiaire entre ces cas extrêmes (voir croquis).

On pourra toujours, en première approximation, le représenter par l'un de ces trois modèles simplissimes. Chacun de ces modèles est en effet défini par un seul et même paramètre (le temps de passage τ) et par une hypothèse sur la macrostructure du réacteur.

Mais ces modèles sont parfois insuffisants, notamment dans les cas où la distribution des temps de séjour joue un rôle important.

III.1.4. Importance de la DTS

Considérons par exemple la stérilisation thermique d'un fluide biologique. Le temps de séjour du fluide

dans l'enceinte chauffée doit être ajustée avec précision. Les germes qui ont un temps de séjour insuffisant ne seront pas détruits. Inversement des molécules organiques fragiles, seront détruites si elles séjournent trop longtemps à la chaleur. Il faut donc une distribution de temps de séjour très « resserrée » autour de la valeur moyenne choisie. Cette propriété est finalement assez générale : quand plusieurs réactions sont en compétition et que l'on désire favoriser sélectivement l'une d'entre elles, on a souvent intérêt à utiliser un réacteur ouvert-piston... ou encore une succession périodique d'opérations discontinues dans un réacteur fermé, en ajustant le temps de passage τ à la valeur désirée.

Pour compenser les faibles performances du réacteur ∞ -mêlé, on peut en associer plusieurs en série pour obtenir une cascade de mélangeurs. Si on augmente le nombre de cuves, en diminuant leurs volumes (pour que le volume total, et donc le temps de séjour moyen reste constant), on obtient des courbes de DTS de plus en plus « resserrées » et à la limite, pour un nombre infini de cuves infiniment petites, on retrouve le cas du tube en écoulement piston (figures 11 et 12).

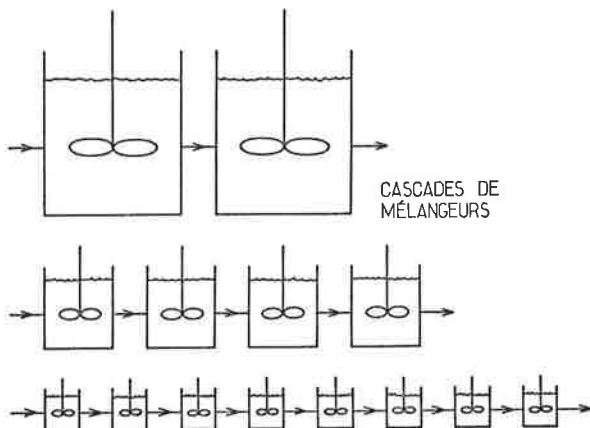


Figure 11.

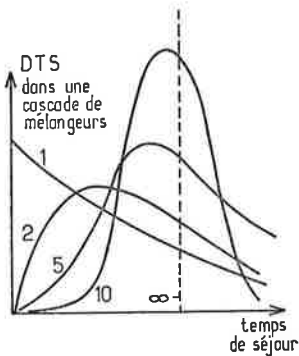


Figure 12.

En présence d'un réacteur réel, de structure interne inconnue mais dont on aura déterminé expérimentalement la DTS, on pourra choisir un modèle, un peu moins simple que les 3 modèles précédents : la cascade de mélangeurs est un modèle à deux paramètres : le temps de passage total τ et le nombre N de mélangeurs choisi pour que la courbe de DTS du modèle soit aussi proche que possible de la courbe expérimentale. Un autre modèle à deux paramètres consiste à superposer un certain « mélangeage » axial (on dit aussi « longitudinal ») à un écoulement-piston. Ce mélangeage sera évalué par un coefficient, variant entre zéro pour l'écoulement-piston et ∞ pour le mélangeage parfait.

III.1.5. Conclusion. Généralisation

La « Science des réacteurs » apparue aux environs de 1955-1960, s'est vite épanouie en un corps de doctrine maintenant bien établi. Cette science permet désormais de calculer le rendement et la sélectivité de n'importe quel type de réacteur. Après les cas très simples que nous venons de présenter, la « Science des réacteurs » a introduit des complications de plus en plus nombreuses. Par exemple, toute réaction étant soit exo-, soit endo-thermique, il faudra tenir compte du transfert de chaleur et commencer par considérer chacun des réacteurs-types précédents et supposer successivement qu'il est soit adiabatique, soit isotherme, etc...

III.2. L'échangeur : transfert de matière entre deux phases

Considérons maintenant un autre exemple simple, celui où deux fluides traversent à débit constant l'appareil. Cette opération ayant pour but de transférer un soluté d'un fluide à l'autre. Ceci correspond à de très nombreuses opérations industrielles : lavage solide-liquide, absorption gaz-liquide, adsorption gaz-solide, extraction liquide-liquide, etc... Pour que le volume de l'appareil soit le plus petit possible, on disperse une phase dans l'autre, afin d'augmenter l'interface et donc le transfert. Cette phase dispersée peut donc être : un solide finement broyé, un gaz dispersé en fines bulles, un liquide dispersé en gouttelettes, etc...

On distingue d'abord trois cas selon que, pendant le transfert de matière est :

les deux phases sont *ouvertes* sur l'extérieur et traversées par des débits constants de fluide, l'une des deux phases est ouverte et l'autre fermée, les deux phases sont *fermées*.

On s'attache ensuite à décrire le *taux de mélangeage axial* de chaque phase dans l'appareil. Dans un cas extrême, l'ensemble des deux phases est vigoureusement brassé dans la cuve de sorte que la concentration de soluté est pratiquement constante en tout point de chaque phase. Cette condition de « mélangeage parfait » est un état-limite qui est assez bien approché dans de nombreux appareils, comme dans le mélangeur-décanteur continu représenté ci-dessous (figure 13).

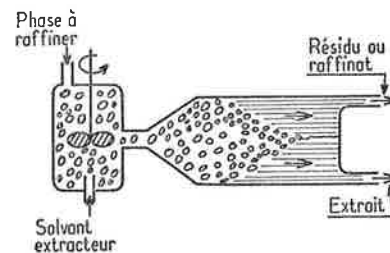
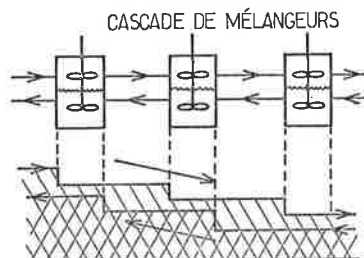


Figure 13.



Profils de concentration du soluté dans la phase à raffiner et dans la phase d'extraction.

Figure 14.

Un autre cas-limite important est la cascade de mélangeurs à contre-courant présentée ci-contre (figure 14).

Un troisième cas-limite est l'échangeur tubulaire continu à contre-courant où chaque phase est en écoulement piston.

A titre d'exemple, la figure 15 compare un échangeur réel aux 2 cas extrêmes de la cuve : parfaitement mélangée et de l'échangeur tubulaire piston :

dans la partie droite, une cuve parfaitement agitée, les profils en tiret montrent que les concentrations sont uniformes dans tout le volume avec une discontinuité à l'entrée de chaque phase ;

dans la partie gauche, une colonne à bulles à contre-courant : les profils en trait plein correspondent à l'écoulement piston de chaque phase et montrent que les concentrations varient continûment de l'entrée à la sortie de l'échangeur ;

les courbes pointillées dans la partie gauche correspondent au cas intermédiaire de phases partiellement mélangées.

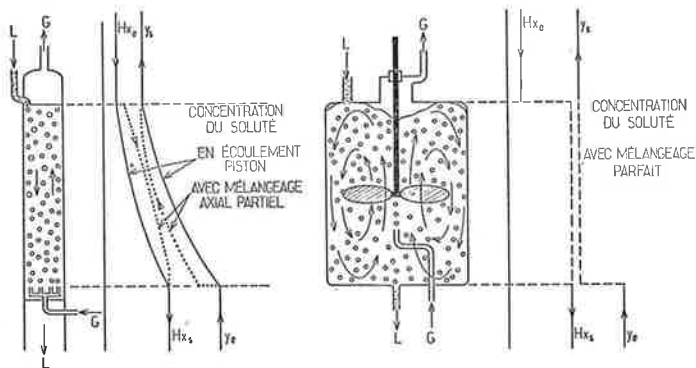


Figure 15. Influence du mélangeage axial sur le profil de concentration.

L'intuition fait comprendre et le calcul montre que c'est le mode d'écoulement piston dans chaque phase qui conduit au meilleur rendement de transfert et à la meilleure sélectivité...

Les percolateurs

Une autre famille importante d'échangeurs de matière entre phases est celle des percolateurs où une phase fixe fermée est en contact avec une phase mobile ouverte à concentration variable. Toutes les colonnes de chromatographie, d'adsorption, de résines échangeuses d'ions, etc... appartiennent à cette famille. A titre d'exemple, la figure 16 montre une colonne de résine échangeuse d'ions servant à l'adoucissement d'une eau calcaire. La colonne a un fonctionnement périodique. Les périodes d'adoucissement

alternent avec des périodes de régénération (figure 17). Pour maximiser la production et minimiser les coûts, le problème essentiel est de prévoir la vitesse de progression des fronts de concentration dans la colonne et surtout la déformation de ces fronts. Certains se raidissent, ce qui est excellent pour la qualité de l'opération, d'autres se dispersent, ce qui est préjudiciable au bon fonctionnement. Il existe désormais une théorie qui permet de prévoir cette évolution des fronts.

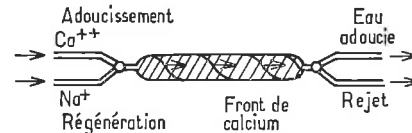


Figure 16.

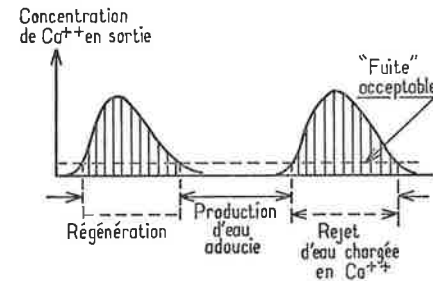


Figure 17.

III.3. Conclusion : il y a de nouvelles structures d'échangeurs à découvrir

Nous arrivons à la conclusion que, dans cette analyse de la dynamique interne des systèmes, la science des échangeurs de matière et/ou de chaleur entre phases, est un chapitre très important.

Cette science est actuellement en plein développement.

Il existe encore de nombreuses configurations géométriques et de nombreux modes de fonctionnement qui n'ont guère été étudiés et mériteraient de l'être.

De plus, pour chaque configuration, on peut compliquer à l'infini en introduisant d'autres phénomènes, par exemple :

des réactions chimiques, dans une phase ou à l'interface ;

des facteurs thermiques, imposés ou venant spontanément des réactions ;

des facteurs mécaniques tels que gradients de pression ou de vitesse, renouvellement d'interface, etc...

Des recherches sont en cours dans tous ces domaines, mais pour tous les échangeurs « classiques », les services d'ingénierie disposent déjà de modèles et de méthodes relativement sûrs et efficaces.