Caractérisation expérimentale de la Distribution de Temps de Séjour dans des réacteurs structurés fabriqués par impression 3D

Franco OTAOLA[1], Stéphane MOTTELET[1], Erwann GUENIN[1], Denis LUART[1], Mikel LETURIA[1]

[1]Université de technologie de Compiègne, ESCOM, TIMR (Transformations Intégrées de la Matière Renouvelable), Centre de recherche Royallieu - CS 60 319 - 60 203 Compiègne Cedex, France

Contexte et objectif

La fabrication additive (ou « impression 3D ») rencontre un nombre croissant d'applications dans le domaine du Génie des Procédés (*e.g.*, micromélangeurs, microéchangeurs, microréacteurs, etc.). Elle permet de réduire considérablement le temps de passage de la conception à la fabrication du dispositif. Par ailleurs, la chimie de flux requiert fréquemment la mise en œuvre de réactions fluide-solide catalytiques (catalyse hétérogène). Les réacteurs à lit fixe sont souvent utilisés mais ne sont pas sans poser certains problèmes : pertes de charge élevées, formation de chemins préférentiels due à l'empilement aléatoire des particules, etc. La fabrication additive permet d'accéder à de nouveaux réacteurs avec des structures internes complexes et continues, notamment les POCS (*Periodic Open Cell Structures*). Ces réacteurs structurés possèdent de nombreux avantages : fraction de vide élevée entraînant une faible perte de charge, surface de contact fluide-solide élevée, intensification des phénomènes de transfert, changement d'échelle aisé, etc. (Cybulski, 2005 ; Kashid, 2014). Néanmoins, les coûts de développement et d'optimisation de ces réacteurs structurés restent élevés, comparativement aux catalyseurs en vrac utilisés dans les autres types de réacteurs.

La Distribution de Temps de Séjour (DTS) permet de décrire l'hydrodynamique d'un réacteur de manière globale et d'évaluer la dispersion d'un écoulement non idéal. L'étude de la DTS fournit des données essentielles pour l'analyse, voire la prédiction des performances d'un réacteur telles que le taux de conversion ou la sélectivité (Schweich, 2001). Ainsi, ce travail vise à caractériser la DTS au sein de réacteurs structurés de type POCS (*Periodic Open Cell Structures*).

Démarche mise en œuvre

Pour ce faire, la démarche mise en œuvre dans cette étude consistait à :

- Fabriquer des réacteurs structurés de type POCS par stéréolithographie (fabrication additive, technologie SLA). Comme présenté en Figure 1 (a, b et c), une structure POCS correspond à un réseau d'entretoises formant des cellules unitaires interconnectées (Busse, 2018).
- Développer un dispositif expérimental automatisé de caractérisation de la DTS en phase liquide (Figure 1.d et e).
- Valider ce dispositif expérimental en étudiant un lit fixe modèle (lit de billes de verre) et en comparant les résultats obtenus aux données publiées dans la littérature (Delgado, 2006 ; Han, 1985).
- Etudier et comparer 3 réacteurs structurés : 1 réacteur monolithique à canaux droits circulaires et 2 réacteurs de type POCS.

Principaux résultats et conclusion

L'analyse des résultats obtenus se base principalement sur la détermination, la comparaison et l'étude de l'évolution du coefficient de dispersion axiale (D_{ax}) avec la vitesse interstitielle de la phase liquide (u_{int}). Les principales conclusions sont les suivantes :

- Les valeurs de D_{ax} obtenues pour le lit fixe modèle (lit de billes de verre) sont en très bonne adéquation avec les données de la littérature, ce qui permet de valider le dispositif expérimental automatisé de caractérisation de la DTS en phase liquide.
- Pour l'ensemble des réacteurs caractérisés, il est possible d'établir une relation de type loi puissance entre le coefficient de dispersion axiale (D_{ax}) et le nombre de Peclet moléculaire (Pe_m) : $D_{ax}/D_m = b\ Pe_m^n = b\left(u_{int}\ d_p/D_m\right)^n$, avec un exposant n inférieur à 1.
- Les réacteurs de type POCS présentent des écoulements moins dispersés que le réacteur monolithique à canaux droits circulaires.
- Pour des porosités (ε) relativement proches, le comportement des réacteurs POCS se rapproche de celui des lits fixes.

L'ensemble de ces résultats montre que les réacteurs POCS pourraient combiner les avantages des lits fixes du point de vue hydrodynamique (écoulement faiblement dispersé) avec ceux des réacteurs monolithiques traditionnels (canaux droits), notamment la faible perte de charge et l'intensification des phénomènes de transfert. Ces résultats expérimentaux permettront également de valider un modèle de simulation numérique (CFD), qui permettra d'étudier numériquement l'influence des dimensions caractéristiques et du type de cellule unitaire utilisés dans les réacteurs POCS.

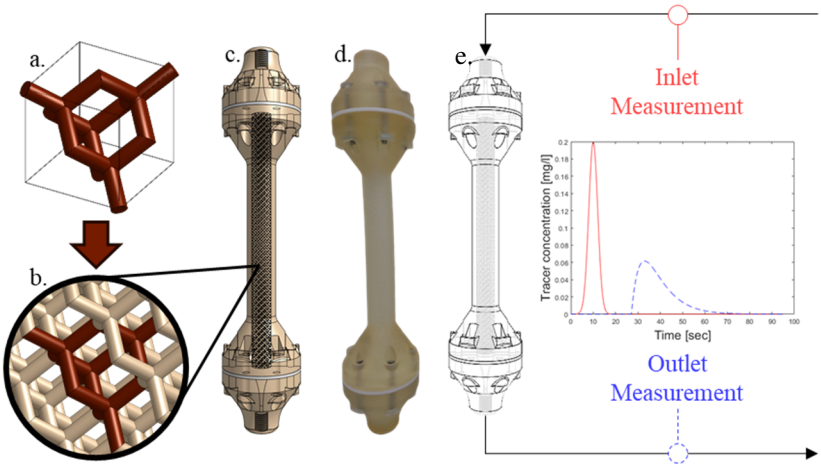

Figure 1 : a. Cellule unitaire de type diamant ; b. Structure interne ; c. Modèle CAO du réacteur structuré ; d. Réacteur obtenu par impression 3D ; e. Principe de la mesure expérimentale de DTS

Références bibliographiques

Busse, C.; Freund, H.; Schwieger, W., Intensification of heat transfer in catalytic reactors by additively manufactured periodic open cellular structures (POCS), *Chemical Engineering and Processing - Process Intensification*, 2018, 124, 199-214.

Cybulski, A.; Moulijn, J.A., Structured catalysts and reactors, CRC press, 2005.

Delgado, J. M. P. Q., A critical review of dispersion in packed beds, *Heat and Mass Transfer*, 2006, 42 (4), 279-310.

Han, N.-W.; Bhakta, J.; Carbonell, R. G., Longitudinal and lateral dispersion in packed beds: Effect of column length and particle size distribution, *AIChE Journal*, 1985, 31 (2), 277-288.

Kashid, M.N.; Renken, A.; Kiwi-Minsker, L., Microstructured devices for chemical processing, John Wiley & Sons, 2014.

Schweich, D., Génie de la réaction chimique, Tec & Doc, 2001.