

5 crédits	30.0 h + 30.0 h	Q2
-----------	-----------------	----

Enseignants	De Wilde Juray ;
Langue d'enseignement	Anglais
Lieu du cours	Louvain-la-Neuve
Thèmes abordés	Les différents types de réacteurs chimiques et leur modélisation sont adressés.
Acquis d'apprentissage	<p><b>Contribution du cours au référentiel du programme</b> Faisant référence aux acquis d'apprentissage du diplôme KIMA, les AAs suivants sont visés:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Axe 1: 1.1, 1.2, 1.3;</li> <li>• Axe 2: 2.2, 2.4, 2.5;</li> <li>• Axe 3: 3.2;</li> <li>• Axe 4: 4.1, 4.4;</li> <li>• Axe 5: 5.3, 5.5, 5.6;</li> <li>• Axe 6: 6.1, 6.3.</li> </ul> <p><b>Acquis d'apprentissage spécifiques au cours</b> (Il est fait référence aux chapitres et sections du livre de référence qui est utilisé-voir ci-dessous).</p> <p><b>Chapitre 7: La modélisation des réacteurs chimiques</b> <b>Après avoir réussi ce cours, l'étudiant sera capable de:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Décrire les différents aspects des bilans de masse, de chaleur et de quantité de mouvement</li> <li>• Dériver les équations de continuité fondamentales des espèces et de l'énergie, tant dans la forme générale que dans des formes simplifiées pour des cas spécifiques</li> </ul> <p><b>Chapitre 8: Les réacteurs batch et semi-batch</b> <b>Après avoir réussi ce cours, l'étudiant sera capable de:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Dériver les équations de continuité pour les réacteurs batch isothermes et non isothermes</li> <li>• Utiliser les équations de continuité pour les réacteurs batch isothermes et non isothermes afin de simuler ou concevoir un réacteur</li> <li>• Expliquer les différentes stratégies d'opération optimale et de contrôle</li> </ul> <p>1 <b>Chapitre 9: Le réacteur à écoulement piston</b> <b>Après avoir réussi ce cours, l'étudiant sera capable de:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Dériver les équations de continuité pour les réacteurs à écoulement piston adiabatiques et non adiabatiques ainsi que isothermes et non isothermes</li> <li>• Utiliser les équations de continuité pour les réacteurs à écoulement piston afin de simuler ou concevoir un réacteur</li> </ul> <p><b>Chapitre 10: Le réacteur parfaitement mélangé</b> <b>Après avoir réussi ce cours, l'étudiant sera capable de :</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Dériver les bilans de masse et d'énergie pour un réacteur parfaitement mélangé</li> <li>• Utiliser les bilans de masse et d'énergie pour la simulation et la conception d'un réacteur</li> <li>• Faire un choix entre un réacteur à écoulement piston et un réacteur parfaitement mélangé pour une application donnée sur base de différents critères (conversion, sélectivité, chaleur de réaction, etc.)</li> <li>• Analyser la stabilité d'un réacteur parfaitement mélangé et étudier le comportement transitoire éventuel</li> </ul> <p><b>Chapitre 11: Réacteurs catalytique à lit fixe</b> <b>PREMIÈRE PARTIE : INTRODUCTION</b> <b>Après avoir réussi ce cours, l'étudiant sera capable de:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Décrire les différents types de réacteurs à lit fixe</li> <li>• Décrire certaines des applications importantes des réacteurs à lit fixe</li> <li>• Décrire et appliquer les différents facteurs impliqués dans la conception préliminaire des réacteurs à lit fixe</li> <li>• Décrire les différents types de modèles qui sont utilisés pour la simulation et la conception des réacteurs à lit fixe ainsi que les hypothèses liées à ces modèles</li> </ul>

## DEUXIEME PARTIE : MODÈLES PSEUDOHOMOGENES

Après avoir réussi ce cours, l'étudiant sera capable de:

- Dériver le modèle de base unidimensionnel pour les réacteurs à lit fixe
- Appliquer le modèle de base unidimensionnel pour la simulation et la conception des réacteurs à lit fixe
- Décrire l'emballlement d'une réaction dans un réacteur à lit fixe
- Expliquer l'utilisation d'un réacteur adiabatique multi-lits et la manière de calculer le nombre de lits requis (y compris la méthode graphique) et leur taille
- Expliquer l'utilisation d'un réacteur multitubulaire et la façon de calculer sa taille, le nombre de tubes, et la température du fluide pour l'échangeur de chaleur
- Dériver les équations du modèle pour le cas d'un réacteur à lit fixe avec échange de chaleur entre la charge et l'effluent ou entre la charge et le gaz se trouvant dans le réacteur
- Décrire une opération auto-thermique
- Décrire le phénomène de désactivation du catalyseur et le comportement non-stationnaire des réacteurs à lit fixe qui y est lié
- Expliquer l'utilisation d'un modèle unidimensionnel avec mélange axial et dériver les équations du modèle
- Expliquer l'utilisation de modèles bidimensionnels pseudo-homogènes pour les réacteurs à lit fixe

## TROISIÈME PARTIE : MODELES HETEROGENES

Après avoir réussi ce cours, l'étudiant sera capable de:

- Établir le modèle unidimensionnel pour les réacteurs à lit fixe qui prend en compte les gradients inter-faciaux et appliquer ce modèle pour la simulation et la conception d'un réacteur
- Établir le modèle unidimensionnel pour les réacteurs à lit fixe qui prend en compte les gradients inter-faciaux et intra-particulaires et appliquer ce modèle pour la simulation et la conception d'un réacteur

### Chapitre 12: Modelisation des écoulements complexes

Après avoir réussi ce cours, l'étudiant sera capable de:

- Expliquer le macro- et micro-mélange dans les réacteurs
- Expliquer qualitativement les différents types de modèles qui prennent explicitement en compte le mélange
- Expliquer le concept, le potentiel et les limites de la méthode de distribution de temps de séjour (Residence Time Distribution - RTD)
- Calculer la RTD d'un réacteur parfaitement mélangé
- Déterminer expérimentalement la RTD d'un réacteur
- Tirer des informations sur l'écoulement à partir de mesures de la RTD
- Calculer la RTD pour une série de n réacteurs parfaitement mélangés
- Appliquer la RTD à la simulation et la conception de réacteurs, avec application directe pour

· Réaction(s) de premier ordre dans des réacteurs isothermes parfaitement mélangés, à écoulement piston ou comprenant une série de cuves parfaitement mélangées

· Réaction bi-moléculaire de second ordre dans un réacteur isotherme parfaitement mélangé et dans une succession de réacteurs isothermes à écoulement piston et parfaitement mélangés: différence entre complètement macro-mélangés vs complètement macro-et micro-mélangés

- Décrire le concept de modèles multi-zones
- Décrire le concept de dispersion axiale et les modèles de réacteurs en série ainsi que d'en tirer et d'appliquer les équations de continuité

### Chapitre 13: Les réacteurs à lit fluidisé et risers

Après avoir réussi ce cours, l'étudiant sera capable de:

- Décrire les aspects technologiques des réacteurs à lit fluidisé et des risers
- Décrire les applications les plus importantes des réacteurs à lit fluidisé
- Décrire les caractéristiques importantes de la fluidisation et du transport de matière solide
- Définir et modéliser le transfert de chaleur dans les lits fluidisés
- Établir un modèle bi-phasique pour les réacteurs à lit fluidisé
- Établir le modèle basique pour un riser
- Appliquer les modèles pour les réacteurs à lit fluidisé et pour les risers pour la simulation et la conception d'un réacteur

### Chapitre 14: Les réacteurs à écoulements poly-phasiques

Après avoir réussie cours, l'étudiant sera capable de:


- Décrire les différents types de réacteurs à écoulements multiphasiques:

- Colonnes à garnissage
- Colonnes plates
- Colonnes vides
- Réacteurs agités
- Etc'

- Décrire(y compris leurs hypothèses), dériver et appliquer les modèles de conception les plus fréquemment utilisés pour les réacteurs à écoulements multiphasiques:

	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Phases gazeuse et liquide complètement mélangées</li> <li>• Phase gazeuse et liquide en écoulements piston</li> <li>• Phase gazeuse en écoulement piston, phase liquide complètement mélangée</li> </ul> <p>a. <u>Autre / Transversal</u></p> <p><b>Après avoir réussi ce cours, l'étudiant sera capable de:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Rechercher des informations scientifiques et techniques dans un livre.</li> <li>• Rapporter une étude technique d'une manière scientifique et concise (mini-projet « reformage à la vapeur du méthane: simulation du réacteur et étude de sensibilité »).</li> <li>• Travailler en petits groupes.</li> <li>• Etre critique et poser des questions.</li> <li>• Vérifier les unités des différentes variables et des termes qui apparaissent dans les équations mathématiques.</li> <li>• Utiliser un corpus de connaissances en sciences fondamentales et polytechniques, permettant de résoudre des problématiques disciplinaires cadrées</li> <li>• Analyser, organiser et mener à son terme une démarche d'ingénierie appliquée au développement d'un procédé répondant à un besoin ou à une problématique cadrée, à l'analyse d'un phénomène physique donné ou un système.</li> <li>• Contribuer, en équipe, à la réalisation d'un projet disciplinaire ou pluridisciplinaire en respectant une approche cadrée.</li> <li>• Communiquer efficacement oralement et par écrit, en français et en anglais, les résultats des missions qui lui sont confiées.</li> <li>• Faire preuve de rigueur et d'esprit critique dans ses démarches scientifiques et techniques en se souciant de l'éthique.</li> </ul> <p>-----</p> <p><i>La contribution de cette UE au développement et à la maîtrise des compétences et acquis du (des) programme(s) est accessible à la fin de cette fiche, dans la partie « Programmes/formations proposant cette unité d'enseignement (UE) ».</i></p>
<p>Modes d'évaluation des acquis des étudiants</p>	<p>Les étudiants sont évalués individuellement. Les exigences seront précisées explicitement avant l'examen. L'examen consiste en une partie théorique et un exercice. Ce dernier est à livre ouvert (seul le livre utilisé pour le cours peut être utilisé) et compte pour 20% de la cote finale.</p> <p>L'examen théorique comprend une préparation écrite et une défense/discussion orale. L'exercice est écrit.</p> <p>Evaluation de mini-Project</p> <p>Un mini-projet sur la simulation d'un réacteur de reformage à la vapeur du méthane, y compris une étude de sensibilité paramétrique, est évalué. Cette note compte pour 10% de la cote finale.</p>
<p>Méthodes d'enseignement</p>	<p>Les concepts physiques et la théorie sont expliqués dans les sessions théoriques. Les étudiants sont encouragés à poser des questions. Au début de chaque cours théorique, le cours est mis en contexte et un aperçu de ce qui sera étudié est donné. A la fin de chaque session théorique, le contenu est résumé et placé à nouveau dans son contexte. Une séance avec des exercices suit chaque session théorique pour pratiquer de la théorie. Les exercices portent si possible sur des problèmes pratiques.</p> <p>Un mini-projet « simulation trois-dimensionnelle du refroidissement type 'cold-shot' dans un réacteur de synthèse d'ammoniac à lit fixe » vise à familiariser les étudiants avec les modèles de simulation type CFD (Computational Fluid Dynamics) et différents aspects importants, comme la modélisation de la turbulence, les conditions aux parois, l'indépendance des résultats au maillage, l'interprétation des résultats, etc.. En groupe de 2-3, les étudiants sont demandés de proposer un design de refroidissement type 'cold-shot' et d'évaluer sa performance en terme de refroidissement et uniformité de température par simulation CFD. Outre le développement des compétences techniques des étudiants, le mini-projet vise à familiariser les étudiants avec le travail en groupe et à enseigner aux étudiants comment rapporter une étude technique typique d'une manière scientifique et concise.</p> <p>Un mini-projet « reformage à la vapeur du méthane: simulation du réacteur et étude de sensibilité » permet aux étudiants d'appliquer un modèle de réacteur à lit fixe avec une cinétique de réaction, en prenant en compte les limitations de transfert de masse et de chaleur inter-faciaux et les limitations de diffusion intra-particulaires pour concevoir un reformeur à vapeur commercial. Par ailleurs, la sensibilité de la performance du réacteur à un certain nombre de variables est étudiée. Outre le développement des compétences techniques des étudiants, le mini-projet vise également à familiariser les étudiants avec le travail en groupe (de 2 à 3) et à enseigner aux étudiants comment rapporter une étude technique typique d'une manière scientifique et concise, tant par écrit que oralement devant un public.</p> <p>Des séances de laboratoires sur les réacteurs à lit fixe et à lit fluidisé sont prévues. Elles visent à familiariser les étudiants avec ces deux technologies importantes de réacteur et à effectuer des mesures du comportement hydrodynamique et de confronter ces données expérimentales avec des corrélations théoriques.</p> <p>En préparation de l'examen, une séance question-réponse ainsi qu'une discussion sur le contenu des cours sont prévues.</p>
<p>Contenu</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• La modélisation des réacteurs chimiques;</li> <li>• Les réacteurs batch et semibatch;</li> <li>• Le réacteur à écoulement piston;</li> <li>• Le réacteur bien mélangé;</li> <li>• Réacteurs à écoulement complexe;</li> <li>• Réacteurs catalytiques à lit fixe;</li> <li>• Réacteurs à lit fluidisé et de transport;</li> <li>• Réacteurs à écoulement multiphasiques.</li> </ul>

Ressources en ligne	<a href="https://moodleucl.uclouvain.be/course/view.php?id=10045">https://moodleucl.uclouvain.be/course/view.php?id=10045</a>
Bibliographie	<p>Livre: "Chemical Reactor Analysis and Design" par G.F. Froment, K.B. Bischoff, and J. De Wilde, 3ème edition. Wiley, 2010.</p> <p>Le livre peut être acheté via la librairie Libris-Agora à Louvain-la-Neuve ou directement via le web. Quelques exemplaires du livre sont disponibles dans la bibliothèque BSE.</p>
Autres infos	<p>Une attention particulière est accordée aux unités des différentes variables et des termes apparaissant dans les équations mathématiques de ce cours.</p> <p>Il est recommandé d'avoir des connaissances en :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Mathématique (analyse),</li> <li>• Chimie (bases),</li> <li>• Phénomènes de transport,</li> <li>• Cinétique réactionnelle</li> </ul>
Faculté ou entité en charge:	FYKI

<b>Programmes / formations proposant cette unité d'enseignement (UE)</b>				
Intitulé du programme	Sigle	Crédits	Prérequis	Acquis d'apprentissage
Master [120] : ingénieur civil en chimie et science des matériaux	KIMA2M	5		
Master [120] : ingénieur civil biomédical	GBIO2M	5		