

5.00 crédits	30.0 h + 30.0 h	Q2
--------------	-----------------	----

Enseignants	De Wilde Juray ;Mignon Denis ;
Langue d'enseignement	Français
Lieu du cours	Louvain-la-Neuve
Préalables	Ce cours suppose acquises : <ul style="list-style-type: none"> <li>• les notions de chimie quantitative (thermodynamique et cinétique) telles qu'enseignées dans le cours LEPL1302;</li> <li>• les notions de chimie organique telles qu'enseignées dans le cours LMAPR1230.</li> </ul>
Thèmes abordés	<p><b>Partie I : Cinétique chimique et physique</b></p> <p>Chapitre 1: Eléments de la cinétique réactionnelle &amp; Cinétique des réactions radicalaires en chaîne</p> <p>Chapitre 2: Cinétique des réactions catalytiques hétérogènes</p> <p>Chapitre 3: Processus de transport avec des réactions catalysées par des solides : Transferts interfaciaux &amp; transport intra-particulaire</p> <p>Chapitre 4: Les réactions non catalytiques gaz-solide</p> <p>Chapitre 5: Désactivation du catalyseur</p> <p>Chapitre 6: Réactions gaz-liquide</p> <p><b>Partie II : Thermodynamique chimique et équilibres de phases</b></p> <p>Chapitre 1: Equilibre des phases - Systèmes réels à un ou plusieurs constituants</p> <p>Chapitre 2: Applications pratiques des équilibres de phases – Introduction au génie chimique</p>
Acquis d'apprentissage	<p><b>A la fin de cette unité d'enseignement, l'étudiant est capable de :</b></p> <p>Eu égard au référentiel AA du programme « Bachelier ingénieur civil », ce cours contribue au développement, à l'acquisition et à l'évaluation des acquis d'apprentissage suivants:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Axe 1: 1.1, 1.2, 1.3</li> <li>• Axe 2: 2.2, 2.3, 2.4, 2.5, 2.6, 2.7</li> <li>• Axe 5 : 5.3, 5.4 ,5.5</li> </ul> <p><b>Acquis d'apprentissage spécifiques au cours</b></p> <p><b>A la fin du cours, l'étudiant sera capable de:</b></p> <p><b>Chapitre I.1: Eléments de la cinétique réactionnelle</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Définir les enjeux et la méthodologie utilisée dans la modélisation cinétique des réactions chimiques.</li> <li>• Définir les vitesses de réaction et leurs expressions.</li> <li>• Expliquer les bases de la théorie des collisions et du complexe activé</li> <li>• Calculer l'énergie d'activation d'une réaction chimique.</li> <li>• Définir les bases de la modélisation des réactions complexes et des réseaux de réaction ainsi que de la réduction de la taille d'un modèle cinétique et le nombre de paramètres indépendants du modèle.</li> <li>• Expliquer les étapes des réactions radicalaires en chaîne droite.</li> <li>• Expliquer les expressions cinétiques pour les exemples importants: craquage thermique de l'éthane et polymérisation radicalaire homogène.</li> <li>• Calculer la cinétique de réaction sur base du mécanisme, dans des cas similaires à ceux vus aux séances d'exercice.</li> </ul> <p><b>Chapitre I.2: Cinétique des réactions catalytiques hétérogènes</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Définir les différentes étapes impliquées dans des réactions catalytiques hétérogènes.</li> <li>• Faire une distinction entre l'adsorption idéale et non idéale sur un catalyseur.</li> <li>• Dériver les équations de vitesse de Hougen-Watson et Eley-Rideal pour des réactions simples et couplées.</li> <li>• Traiter des réactions catalytiques complexes, en particulier pour générer le réseau de réactions et de réduire le nombre de paramètres indépendants du modèle.</li> <li>• Concevoir des réacteurs expérimentaux afin de modéliser la cinétique de réactions catalytiques hétérogènes.</li> <li>• Discriminer différents modèles cinétiques et estimer les paramètres du modèle.</li> <li>• Concevoir des expériences d'une manière séquentielle, pour une discrimination optimale entre modèles cinétiques ou pour l'estimation de paramètres optimaux.</li> </ul>

### Chapitre I.3: Processus de transport avec des réactions catalysées par des solides : Transferts interfaciaux & transport intra-particulaire

- Dériver la loi de Fick pour un gaz parfait sur base d'un modèle simplifié et faire le lien avec la loi de Fourier.
- Dériver l'équation de la diffusion (deuxième loi de Fick) sur base macro- et microscopique.
- Décrire la diffusion multi-composants dans un fluide.
- Expliquer la notion de contrôle diffusionnel des réactions chimiques et son importance pratique.
- Décrire la réaction d'un composant d'un fluide à la surface d'un solide.
- Modéliser le transfert de matière et de chaleur à l'interface.
- Calculer les différences de concentration ou de pression partielle ainsi que de température entre le fluide et la surface d'une particule de catalyseur.
- Définir et caractériser la diffusion moléculaire, la diffusion Knudsen et la diffusion de surface dans les pores.
- Décrire la diffusion dans une particule de catalyseur au moyen d'un modèle pseudo-continuum.
- Définir la diffusivité effective dans le catalyseur et la tortuosité d'un catalyseur, ainsi que des méthodes pour les déterminer expérimentalement.
- Donner un aperçu des approches plus fondamentales pour décrire la diffusion dans une particule d'un catalyseur (modèles structure & réseau, simulations utilisant la dynamique moléculaire et simulations dynamiques Monte-Carlo).
- Décrire la combinaison de diffusion et réaction dans une particule de catalyseur au moyen d'un modèle continuum.
- Définir et calculer le module de Thiele et le facteur d'efficacité d'un catalyseur pour une réaction donnée.
- Identifier des effets majeurs des limitations de diffusion intra-particulaire, en particulier sur la falsification des coefficients cinétiques et des énergies d'activation et sur le changement des sélectivités de réactions couplées.
- Définir les critères pour évaluer l'importance des limitations de la diffusion intra-particulaire.

### Chapitre I.4: Les réactions non catalytiques gaz-solide

- Décrire de manière qualitative les réactions gaz-solide et leur modélisation cinétique.

### Chapitre I.5: Désactivation du catalyseur

- Définir et caractériser les principaux types de désactivation d'un catalyseur: transformation de l'état solide, l'empoisonnement et formation de coke.
- Modéliser la cinétique d'empoisonnement homogène d'un catalyseur.
- Modéliser la cinétique de désactivation d'un catalyseur par formation de coke.
- Définir des fonctions de désactivation.
- Décrire la désactivation du catalyseur par recouvrement des sites actifs uniquement et par recouvrement des sites actifs et blocage des pores.
- Décrire l'effet des limitations de la diffusion intra-particulaire sur la désactivation d'un catalyseur par recouvrement des sites actifs et blocage des pores.
- Donner un aperçu des méthodes utilisées pour l'analyse cinétique de la désactivation d'un catalyseur par formation de coke.

### Chapitre I.6: Réactions gaz-liquide



- Décrire de manière qualitative les réactions gaz-liquide et leur modélisation cinétique.
- Dériver et appliquer la théorie des deux films et la théorie de renouvellement de surface.

### Chapitre II.1: Equilibre de phases - Systèmes réels à un ou plusieurs constituants

- Décrire qualitativement l'allure des diagrammes de phase ( $h, P$ ) d'une substance pure et donner des exemples illustrant leur utilité dans la résolution d'un certain nombre de problèmes rencontrés dans l'industrie des procédés.
- Définir le concept de fugacité, discuter de son utilité et en donner une interprétation physique. Montrer comment le coefficient de fugacité d'un gaz pur peut être calculé à partir d'une grandeur mesurable telle que le facteur de compressibilité de ce gaz.
- Donner l'allure de la variation de la compressibilité d'un gaz réel en fonction de la pression et justifier cette allure sur une base physique.
- Justifier l'affirmation de van der Waals que l'équation des gaz parfaits peut être corrigée à l'aide de deux paramètres de manière à tenir compte des interactions entre les molécules constituant le système. Montrer comment la valeur des deux paramètres en question peut être identifiée.
- Démontrer comment la tension de vapeur d'un liquide à une température donnée peut être déduite de l'allure de la courbe de variation de la pression en fonction du volume molaire exprimée selon l'équation de van der Waals.
- Expliquer le concept et l'utilité de la notion de « coefficient de partage à l'équilibre »  $K$  dans le contexte de problèmes impliquant des phases vapeurs et/ou liquides à l'équilibre.
- Dériver des expressions du coefficient de partage  $K$  en termes de coefficients de fugacité et de coefficients d'activité.
- Expliquer comment les équations d'état dérivées de l'équation de van der Waals (p. ex. Soave-Redlich-Kwong ou Peng-Robinson) sont utilisées pour calculer les propriétés thermodynamiques de mélanges liquide-vapeur à l'équilibre, en particulier les coefficients de partage  $K$ .
- Expliquer comment les corrélations de calcul des coefficients d'activité de la phase liquide (p. ex. Wilson, NRTL, UNIQUAC ou UNIFAC) sont utilisées pour calculer les propriétés thermodynamiques, en particulier les coefficients de partage  $K$ , de mélanges liquide-vapeur non idéaux à l'équilibre.

	<p><b>Chapitre II.2: Applications pratiques des équilibres de phases – Introduction au génie chimique</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Expliquer comment déterminer quel type de méthode thermodynamique utiliser dans un problème pratique, sur base de la nature des substances en présence et du domaine de pressions-températures considéré.</li> <li>• Expliquer le principe de fonctionnement d'une colonne de distillation fractionnée et expliquer en quoi la présence d'un azéotrope peut affecter la composition du distillat et du résidu.</li> <li>• Expliquer quels sont les paramètres opératoires importants qui influencent le fonctionnement d'une colonne de distillation et comment l'on peut contrôler pratiquement un tel équipement.</li> <li>• Expliquer l'utilisation de la distillation fractionnée dans le cas du raffinage du pétrole brut. Expliquer également quelle approche est utilisée en simulation de procédés pour cette opération et quelles sont les paramètres opératoires utilisés pour la contrôler.</li> <li>• Expliquer le principe de l'extraction liquide-liquide, son intérêt dans les opérations de séparation et la manière de choisir un bon solvant d'extraction. Citer les types d'équipements utilisés pour cette opération.</li> <li>• Expliquer quels sont les éléments qui caractérisent la demande mondiale de pétrole brut et de produits raffinés, ainsi que son évolution historique passée et future.</li> <li>• Décrire ce qu'est la marge de raffinage, son principe de calcul et les paramètres qui l'influencent.</li> </ul>
Modes d'évaluation des acquis des étudiants	Les étudiants sont évalués individuellement à l'examen selon des exigences précisées à l'avance. Possibilité d'interrogation(s) dispensatoire(s) hors session d'une partie du cours. Certains rapports de projet ou exercices peuvent faire l'objet de cotation et intégrés à la cote finale de l'examen. Chaque partie enseignée par chacun des enseignants compte normalement pour la moitié de la note finale, sauf indication contraire en cours d'année. Cependant, en cas de faiblesse grave ( $\leq 8/20$ ) dans une partie de l'examen, la note globale signifiera un échec à l'examen et sera réduite à 8/20 au maximum.
Méthodes d'enseignement	Les concepts physiques et la théorie sont expliqués dans les sessions théoriques. Une séance avec des exercices pratiques (ou éventuellement de projet) suit chaque cours théorique. Les exercices portent si possible sur des problèmes réels. Pour la préparation de l'examen, une séance questions-réponses et discussion sur le contenu du cours est prévue. Les exercices relatifs à la partie I se baseront sur l'utilisation d'un simulateur de procédés (ASPEN+) permettant de placer les notions théoriques étudiées dans une perspective la plus proche possible de la réalité industrielle.
Contenu	Partie I : Thermodynamique chimique et équilibres de phases Chapitre 1: Equilibre des phases - Systèmes réels à un ou plusieurs constituants Chapitre 2: Applications pratiques des équilibres de phases – Introduction au génie chimique Chapitre 3 : Introduction à l'industrie du raffinage Partie II : Cinétique chimique et physique Chapitre 1: Eléments de la cinétique réactionnelle & Cinétique des réactions radicalaires en chaîne Chapitre 2: Cinétique des réactions catalytiques hétérogènes Chapitre 3: Processus de transport avec des réactions catalysées par des solides : Transferts interfaciaux & transport intra-particulaire Chapitre 4: Les réactions non catalytiques gaz-solide Chapitre 5: Désactivation du catalyseur Chapitre 6: Réactions gaz-liquide
Ressources en ligne	> <a href="https://moodleucl.uclouvain.be/course/view.php?id=10044">https://moodleucl.uclouvain.be/course/view.php?id=10044</a>

<p>Bibliographie</p>	<p>Pour la partie I:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Copie des supports de présentation disponible sur Moodle.</li> <li>• Chapitre 2 du livre : Separation Process Principles, Third Edition, Henley, Seader and Roper, Editeur John Wiley &amp; Sons, 2011, ISBN-13: 978-0470646113.</li> </ul> <p>Pour la partie II:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Livre: "Chemical Reactor Analysis and Design" by G.F. Froment, K.B. Bischoff, and J. De Wilde, 3th ed., Wiley, 2010. Le livre peut être acheté à la librairie Libris-Agora à Louvain-la-Neuve ou directement via le web. Quelques exemplaires du livre sont disponibles dans la bibliothèque ESB.</li> <li>• Syllabus / transparents disponibles sur Moodle</li> </ul> <hr/> <p>For Part I:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Copy of presentation material available on Moodle.</li> <li>• Chapter 2 of book : Separation Process Principles, Third Edition, Henley, Seader and Roper, Editor John Wiley &amp; Sons, 2011, ISBN-13: 978-0470646113.</li> </ul> <p>For Part II:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Book : "Chemical Reactor Analysis and Design" by G.F. Froment, K.B. Bischoff, and J. De Wilde, 3th ed., Wiley, 2010. The book can be purchased via Libris-Agora in Louvain-la-Neuve or directly via the web. Some copies of the book are available in the BSE library..</li> <li>• Slides and documents available on Moodle</li> </ul>
<p>Autres infos</p>	<p>En EPL/FYKI, ce cours est un préalable des cours "Analyse et conception des réacteurs chimiques" (LMAPR2330), ainsi que « Séparations fluide-fluide » (LMAPR2118).</p> <p>Préalables pour suivre LMAPR1400:</p> <p>Ce cours suppose acquises :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• les notions de chimie quantitative (thermodynamique et cinétique) telles qu'enseignées dans le cours LEPL1302;</li> <li>• les notions de chimie organique telles qu'enseignées dans le cours LMAPR1230.</li> </ul>
<p>Faculté ou entité en charge:</p>	<p>FYKI</p>

<b>Programmes / formations proposant cette unité d'enseignement (UE)</b>				
Intitulé du programme	Sigle	Crédits	Prérequis	Acquis d'apprentissage
Mineure en Chimie et Physique Appliquées	MINOFYKI	5		
Filière en Chimie et physique appliquées	FILFYKI	5		
Mineure Polytechnique	MINPOLY	5		