UCL Université catholique de Louvain

LMAPR1400

2015-2016

Cinétique physique et chimique

5.0 crédits	30.0 h + 30.0 h	1q

Enseignants:	Bailly Christian ; De Wilde Juray (coordinateur) ;
Langue d'enseignement:	Français
Lieu du cours	Louvain-la-Neuve
Ressources en ligne:	> http://icampus.uclouvain.be/claroline/course/index.php?cid=MAPR1400
Préalables :	LFSAB1101, LFSAB1102, LFSAB1201, LFSAB1202, LFSAB1301, LFSAB1401, LFSAB1302
Thèmes abordés :	Chapitre 1: Eléments de la cinétique réactionnelle Chapitre 2: Cinétique des réactions radicalaires en chaîne Chapitre 3: Diffusion et cinétique chimique Chapitre 4 -Partie I: Cinétique deréactions catalytiques hétérogènes Chapitre 4 -Partie II: Modélisation cinétique deréactions catalytiques hétérogènes Chapitre 5 -Partie I: Processusde transport avecdes réactions catalyséespar dessolides -Effets des gradientsinterfaciaux Chapitre 6: Les réactions non catalytiques gaz-solide Chapitre 7: Désactivation du Catalyseur Chapitre 8: Réactions gaz-liquide
Acquis d'apprentissage	Contribution du cours au référentiel du programme Faisant référence à la page "Compétences et acquis au terme de la formation" du bac EPL" (http://www.uclouvain.be/prog-2014-fsa1ba-competences_et_acquis), les AAs suivants sont visés: -- Axe 1: 1.1, 1.2; -- Axe 2: 2.3, 2.4, 2.6, 2.7. Acquis d'apprentissage spécifiques au cours Chapitre 1: Eléments de la cinétique réactionnelle A la fin du cours, l'étudiant sera capable de: -- Définir les enjeux et la méthodologie utilisée dans la modélisation cinétique des réactions chimiques. -- Définir les vitesses de réaction et leurs expressions. -- Expliquer les bases de la théorie des collisions et du complexe activé -- Calculer l'énergie d'activation d'une réaction chimique. -- Modéliser des réactions complexes et des réseaux de réaction ainsi que de réduire la taille d'un modèle cinétique et le nombre de paramètres indépendants du modèle. Chapitre 2: Cinétique des réactions radicalaires en chaîne A la fin du cours, l'étudiant sera capable de: -- Expliquer les étapes des réactions radicalaires en chaîne droite et ramifiée et en tirer la cinétique de réaction -- Expliquer les expressions cinétiques pour les exemples importants : craquage thermique de l'éthane, polymérisation radicalaire homogène, hydroperoxydation initiée et inhibée, combustion/explosion de l'hydrogène en présence d'oxygène Pour la polymérisation radicalaire : savoir déterminer la distribution de masse moléculaire et expliquer l'influence de la diffusion moléculaire sur la cinétique. Calculer la cinétique de réaction sur base du mécanisme, dans des cas similaires à ceux vus aux séances d'exercice Résoudre un problème de cinétique de polymérisation non isotherme avec effet Tromsdorff avec l'aide d'outils de modélisation numérique dans le cadre d'un miniprojet en groupe. Chapitre 3: Diffusion et cinétique chimique A la fin du cours, l'étudiant sera capable de: -- Dériver la loi de Fick pour un gaz parfait sur base d'un modèle simplifié et faire le lien avec la loi de Fourier -- Expliquer le théorème fluctuations-dissipations et la loi de Stokes-Einstein pour les particules browniennes --

Dériver l'équation de la diffusion (deuxième loi de Fick) sur base macroscopique et microscopique
--
Expliquer la notion de contrôle diffusionnel des réactions chimiques et son importance pratique.
--
Utiliser l'équation du bilan matière pour obtenir le module de Thiele et le facteur d'efficacité pour les réactions d'ordre 1
Chapitre 4 -Partie I: Cinétique deréactions catalytiques hétérogènes
A la fin du cours, l'étudiant sera capable de:
--
Définir les différentes étapes impliquées dansdes réactions catalytiques hétérogènes.
--
Faireune distinction entre l'adsorption idéale et non idéale sur un catalyseur.
--
Dériver les équations de vitesse de Hougen-Watson et Eley-Ridealpour des réactions simples et couplées.
--
Traiter des réactions catalytiques complexes, en particulier pour générer le réseau de réactions et de réduire le nombre de paramètres indépendants du modèle.
Chapitre 4 -Partie II: Modélisation cinétique deréactions catalytiques hétérogènes
A la fin du cours, l'étudiant sera capable de:
--
Concevoir des réacteurs expérimentaux afin de modéliser la cinétique de réactions catalytiques hétérogènes.
--
Discriminer différents modèles cinétiques et estimer les paramètres du modèle.
--
Concevoir des expériences d'une manière séquentielle, pour une discrimination optimale entre modèles cinétiques ou pour l'estimation de paramètres optimaux.
Chapitre 5 -Partie I: Processusde transport avecdes réactions catalyséespar dessolides -Effets des gradientsinterfaciaux
A la fin du cours, l'étudiant sera capable de:
--
Décrire la réaction d'un composant d'un fluide à la surface d'un solide.
--
Modéliserle transfert de matière et de chaleur à l'interface.
--
Décrire la diffusion multi-composants dans un fluide.
--
Calculer les différences de concentration ou de pression partielle ainsi que de température entre le fluide et la surface d'une particule de catalyseur.
Chapitre 5- PartieII: Processus de transport avec des réactions catalysées par des solides - Effets des gradients intra-particulaires
A la fin du cours, l'étudiant sera capable de:
--
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 & mp; 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 6: Les réactions non catalytiques gaz-solide
A la fin du cours, l'étudiant sera capable de:
Décrire de manière qualitative les réactions gaz-solide et leur modélisation cinétique.
Chapitre 7: Désactivation du Catalyseur
A la fin du cours, l'étudiant sera capable de:
--
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 8: Réactions gaz-liquide A la fin du cours, l'étudiant sera capable de: -- 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. *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) ».*
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. Les parties enseignées par chacun des deux enseignants comptent normalement pour la moitié des points. L'examen peut comporter une partie orale et une partie écrite. L'examen écrit comporte une partie théorique et une d'exercices. Certains rapports de projet peuvent faire l'objet de cotation et intégrés à la cote finale de l'examen. A l'examen, les enseignants se réservent le droit de réduire la pondération d'une partie du cours en cas de faiblesse grave (& t;=8/20) dans une autre. Pour les chapitres 1 et 4-8 : Les exercices sont à livre ouvert (seul le livre/syllabus utilisé pour le cours peut être utilisé). L'examen théorique est soit écrit soit à préparation écrite suivie d'une défense et discussion orale. L'examen d'exercices est écrit et compte pour 20% des points. Le miniprojet compte pour 20% des points. Son évaluation se fait sur base du rapport de groupe. Pour les chapitres 2 et 3 : L'examen est écrit. Le rapport de projet compte pour 1/3 des points.
Méthodes d'enseignement :	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 dans le contexte et un aperçu de ce qui sera étudié est donné. A la fin de chaque session théorique, le contenu est résumé et placé dans son contexte de nouveau. Une séance avec des exercices pratiques (ou éventuellement de projet) suit chaque cours théorique. Les exercices portent si possible sur des problèmes pratiques. Pour la préparation de l'examen, une séance question-réponse et discussion sur le contenu du cours est prévu.
Contenu :	Chapitre 1: Eléments de la cinétique réactionnelle Chapitre 2: Cinétique des réactions radicalaires en chaîne Chapitre 3: Diffusion et cinétique chimique Chapitre 4 -Partie I:Cinétique deréactions catalytiques hétérogènes Chapitre 4 -Partie II:Modélisation cinétique deréactions catalytiques hétérogènes Chapitre 5 -Partie I:Processusde transport avecdes réactions catalyséespar dessolides -Effets des gradientsinterfaciaux Chapitre 6: Les réactions non catalytiques gaz-solide Chapitre 7: Désactivation du Catalyseur Chapitre 8: Réactions gaz-liquide
Bibliographie :	Pour les chapitres 1 et 4 à 7: 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. Pour les chapitres 1, 2, 3 et 5: syllabus / transparents disponibles sur icampus
Autres infos :	En EPL/FYKI, ce cours est un préalable du cours "Analyse et conception des réacteurs chimiques".
Faculté ou entité en charge:	FYKI

Programmes / formations proposant cette unité d'enseignement (UE)

Intitulé du programme	Sigle	Crédits	Prérequis	Acquis d'apprentissage
Mineure en sciences de l'ingénieur: chimie et physique appliquées	LFYKI100I	5	-	