

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 <b>LEPL1302</b> ;</li> <li>• les notions de chimie organique telles qu'enseignées dans le cours <b>LFYKI1203</b>.</li> </ul>
Thèmes abordés	<p><b>Partie I : Thermodynamique chimique et équilibres de phases</b></p> <p>Chapitre 1: Applications pratiques des équilibres de phases – Introduction au génie chimique</p> <p>Chapitre 2: Equilibre des phases - Systèmes réels à un ou plusieurs constituants</p> <p>Chapitre 3: Introduction à l'industrie du raffinage</p> <p><b>Partie II : Cinétique chimique et physique</b></p> <p>Chapitre 1: Éléments de la cinétique réactionnelle &amp; Cinétique des réactions complexes</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>
Acquis d'apprentissage	<p><b>A la fin de cette unité d'enseignement, l'étudiant est capable de :</b></p> <p><b>Contribution du cours au référentiel du programme</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>• Axis 1: AA1.1, AA1.2</li> <li>• Axis 2: AA2.2, AA2.2, AA2.3, AA2.4, AA2.5, AA2.6, AA2.7</li> <li>• Axis 4: AA4.2, AA4.3, AA4.4</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> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Modéliser un procédé basique dans le simulateur Aspen+, choisir la méthode thermodynamique adéquate, optimiser certains paramètres du procédé et analyser de manière critique les résultats.</li> </ul> <p><b>Chapitre I.1: 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 pression-température 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> </ul> <p><b>Chapitre I.2: Equilibre de phases - Systèmes réels à un ou plusieurs constituants</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Décrire qualitativement l'allure des diagrammes de phase (<math>h,P</math>) 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.</li> <li>• 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.</li> <li>• 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.</li> </ul>

- 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.

### Chapitre I.3: Introduction à l'industrie du raffinage

- 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.
- Décrire ce qu'est la marge de raffinage, son principe de calcul et les paramètres qui l'influencent.

### Chapitre II.1: Eléments de la cinétique réactionnelle

- Description de la cinétique des réactions complexes et méthodes de réduction de la complexité des modèles cinétiques.

### Chapitre II.2: Catalyse hétérogène

- Différentes étapes dans une réaction catalytique hétérogène, chemisorption, étapes élémentaires des réactions catalytiques hétérogènes, méthode de Hougen-Watson Langmuir-Hinshelwood et de Eley-Rideal pour la dérivation des expressions cinétiques basé sur étape déterminante de vitesse, méthodologies pour la modélisation cinétique, introduction aux méthodes avancées.

### Chapitre II.3-I: Transferts interfaciaux de matière et de chaleur

- Effet sur vitesse réactionnel observée, concept de coefficient de transfert, modélisation des coefficients de transfert de masse et de chaleur, critères pour évaluation de l'importance des limitations des transferts interfaciaux.

### Chapitre II.3-II: Transport intra-particule

- Effet sur la vitesse réactionnelle observée, propriétés poreuses des particules catalytiques, description continuum d'une particule catalytique et concept de porosité, tortuosité et diffusivité effective, méthodes expérimentales pour déterminer la porosité et tortuosité des catalyseurs, types de diffusion, modélisation de la diffusion-réaction au sein des catalyseur et calcul des profils de concentration, concept de module de Thiele et de facteur d'efficacité, concept de module de Thiele généralisé, critères pour l'évaluation de l'importance des limitations de diffusion intra-particule.

### Chapitre II.4: Introduction aux réactions fluide-particules

- Approches de modélisation.

### Chapitre II.5: Désactivation des catalyseurs

- Différents types de désactivation, désactivation par empoisonnement et approche de modélisation, désactivation par formation de coke et approches de modélisation.

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

- Phénomènes de transport, modèle à deux films diffusion-réaction, exemples de calcul des profils de concentrations intra-filme pour réactions simples et pour le cas général, concept de nombre de Hatta.



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.

Dans le cadre de la partie I, un mini-projet de simulation de procédé est coté et intégré à la cote finale de l'examen. D'autres rapports de projet ou exercices peuvent également faire l'objet de cotation et intégrés à la cote finale de l'examen, le cas échéant.

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	<p>Les concepts physiques et la théorie sont expliqués dans les sessions théoriques.</p> <p>Pour la partie I, les exercices 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.</p> <p>Pour la partie II, 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.</p>
Contenu	<p><b>Partie I : Thermodynamique chimique et équilibres de phases</b></p> <p>Chapitre 1: Applications pratiques des équilibres de phases – Introduction au génie chimique</p> <p>Chapitre 2: Equilibre des phases - Systèmes réels à un ou plusieurs constituants</p> <p>Chapitre 3: Introduction à l'industrie du raffinage</p> <p><b>Partie II : Cinétique chimique et physique</b></p> <p>Chapitre 1: Éléments de la cinétique réactionnelle &amp; Cinétique des réactions complexes</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>
Ressources en ligne	À définir ultérieurement par les enseignants nommés.
Bibliographie	<p>Pour la partie I:</p> <ul style="list-style-type: none"> <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 BSE.</li> </ul> <hr/> <p>For Part I:</p> <ul style="list-style-type: none"> <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, 3rd 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> </ul>
Autres infos	En EPL/FYKI, ce cours est un préalable des cours "Analyse et conception des réacteurs chimiques" ( <b>LMAPR2330</b> ), ainsi que « Séparations fluide-fluide » ( <b>LMAPR2118</b> ).
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
Mineure en Chimie et Physique Appliquées (uniquement pour réinscription)	MINOFYKI	5		
Filière en Chimie et physique appliquées	FILFYKI	5		
Mineure Polytechnique	MINPOLY	5		