

<b>5CI802 Outils numériques pour l'ingénierie chimique</b>									
Mots clés : Génie chimique, Simulation, calcul de réacteurs, méthodes numériques, programmation, gestion de projet, Aspen HYSYS, MATLAB, EXCEL									
Responsable Laugel Guillaume, MdC, Laboratoire de Réactivité de Surface, Sorbonne Université									
<i>ECTS</i>	<i>Cours (h)</i>	<i>TD (h)</i>	<i>TP (h)</i>	<i>Tutorat (h)</i>	<i>Ecrit (%)</i>	<i>CC (%)</i>	<i>TP (%)</i>	<i>Oral (%)</i>	<i>Eval. répartie</i>
6	26	6	16	12	60		40		Non
<p><i>Descriptif de l'UE</i></p> <p>La simulation des procédés est devenue un outil incontournable aussi bien au niveau industriel que dans le domaine de la recherche. Cette UE a pour objectif de donner aux étudiants les connaissances fondamentales et le savoir-faire nécessaire à la simulation des procédés chimiques à l'aide de logiciel industriel tel que Aspen HYSYS.</p> <p>Le réacteur étant le cœur de la plupart des procédés chimiques, cette UE a également pour vocation d'aborder les notions importantes au calcul de réacteurs chimiques.</p> <p>Les étudiants devront utiliser l'ensemble des connaissances acquises (simulation des procédés, calcul de réacteur, méthodes numériques) dans le cadre d'un projet qu'ils devront mener en équipe depuis le choix du modèle jusqu'à la présentation des résultats devant un jury.</p>									
<p><i>Objectifs d'apprentissage</i></p> <p>A la fin de cet enseignement les étudiants seront être capables :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>✓ de mettre au point un procédé (simuler des réacteurs, des séparateurs, des échangeurs,...) en s'appuyant sur des outils de simulation industriels.</li> <li>✓ de choisir des données physicochimiques et des modèles thermodynamiques pertinents.</li> <li>✓ de mettre en place la simulation</li> <li>✓ de maîtriser un simulateur de procédé industriel au travers de la compréhension de son fonctionnement.</li> <li>✓ de communiquer sur la méthodologie retenue et de présenter les résultats en regard des limitations des modèles utilisés.</li> </ul>									
<p><i>Prérequis</i></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>✓ Avoir des notions de bilan matière et chaleur</li> <li>✓ Avoir des notions de thermodynamique et de cinétique chimique</li> </ul>									
<i>Langue<sup>(1)</sup></i>	<i>Cours, TD, TP</i>						<i>Documents</i>		<i>Bibliographie</i>
Français	Documents de cours et de TD en français						Français/Anglais		

(1) D'une manière générale, les documents de cours sont à rédiger en anglais. Les sujets d'examen sont en anglais ou accompagnés d'une explication en anglais s'il y a des étudiants non francophones.

## ***Fonctionnement de l'UE***

### *Partie Calcul de réacteur :*

- ✓ Introduction au calcul de réacteur
- ✓ Vocabulaire de base de la transformation chimique
- ✓ Aperçu de la cinétique des réactions en phase homogène de la thermodynamique
- ✓ Bilan massique dans les réacteurs idéaux
- ✓ Sélectivité et taux de conversion des réactions en phase homogène
- ✓ Réacteurs non-isothermes
- ✓ Bilan massique et thermique dans les réacteurs idéaux
- ✓ Comparaison entre les réacteurs : isothermes, adiabatiques, et pseudo isotherme
- ✓ Cas particulier des réactions exothermique dans les réacteurs parfaitement agités

### *Partie méthodes numériques pour les chimistes :*

- ✓ Mise en équation et degré de liberté
- ✓ Modèles thermodynamiques
- ✓ Résolution des systèmes d'équations linéaires et non-linéaires
- ✓ Résolution d'équations différentielles (méthodes d'Euler et de Runge-Kutta)
- ✓ Présentation des outils de simulation