

Chemische reactoren: principes en toepassingen (E072110)

Cursusomvang (nominale waarden; effectieve waarden kunnen verschillen per opleiding)

Studiepunten 6.0

Studietijd 180 u

Aanbodsessies en werkvormen in academiejaar 2024-2025

A (semester 1)	Nederlands	Gent	groepswerk	2.5u
B (semester 1)	Engels	Gent	peer teaching hoorcollege groepswerk werkcollege	

Lesgevers in academiejaar 2024-2025

Van Steenberge, Paul	TW11	Verantwoordelijk lesgever
Bos, René	TW11	Medelesgever

Aangeboden in onderstaande opleidingen in 2024-2025

	stptn	aanbodsessie
Brugprogramma Master of Science in Chemical Engineering	6	B
Master of Science in Electromechanical Engineering (afstudeerrichting Control Engineering and Automation)	6	B
Master of Science in Electromechanical Engineering (afstudeerrichting Electrical Power Engineering)	6	B
Master of Science in Electromechanical Engineering (afstudeerrichting Maritime Engineering)	6	B
Master of Science in Electromechanical Engineering (afstudeerrichting Mechanical Construction)	6	B
Master of Science in Electromechanical Engineering (afstudeerrichting Mechanical Energy Engineering)	6	B
Master of Science in Chemical Engineering	6	B
Master of Science in de ingenieurswetenschappen: chemische technologie	6	A

Onderwijstalen

Engels, Nederlands

Trefwoorden

Ideale reactoren, niet-ideale reactoren, transportlimiteringen, tubulaire reactoren, reactoren met gepakt bed, reactoren met gefluidiseerd bed, gasvloeistofreactoren, continu doorstroomde reactoren, ladingsgewijs bedreven reactoren, verblijftijdverdeling, reactorstabiliteit, adiabatische reactoren, niet-isotherme reactoren, regressieanalyse voor snelheidsvergelijkingen, lab-schaal reactoren, kinetiek, kinetische parameterschatting, parametrische sensitiviteit, multipliciteit en hysteresis in reactoren, chemische versnelling, reactorkeuze

Situering

Steunend op opleidingsonderdelen zoals 'Scheikundige thermodynamica II (E071020)', 'Warmtetechniek en Stofftransport (E045910)' en 'Analysetechnieken (E071030)' en 'Introductie tot reactorkunde en kinetiek (E071040)', leidt het eerste luik van dit opleidingsonderdeel de principes in voor het wiskundig ontwerp van belangrijke chemische reactor types gebruikt in de chemische procesindustrie. Een tweede luik van dit opleidingsonderdeel behelst de toepassing van deze principes op de meest belangrijke chemische reactoren.

Inhoud

- Hoorcolleges

- Samenvatting van isotherme reactoren met ideaal stromingspatroon: batchreactor met ideale menging, stationaire propstroomreactor, stationaire ideaal gemengde reactor
- Isotherme continue reactoren met niet-ideaal stromingspatroon: verband tussen stromingspatroon en verblijftijdsverdeling, invloed van de verblijftijdsverdeling op de conversie, macromenging, modellen voor niet-ideale stroming: cascade van CSTRs, axiale dispersie model, Péclet getal, micromenging, segregatie, *earliness of mixing*
- Samenvatting van stoichiometrische beginselen en hun toepassing op complexe reacties in reactoren
- Complex gedrag in niet-isotherme reactoren: Samenvatting van thermodynamische beginselen, toepassing op energie- en enthalpiebalansen voor diverse reactor modellen; concept van thermisch vermogen; integratie van enthalpie- en massabalansen, werklijnen, multipliciteit, ontsteking en uitdoving, hysteresis, reactorstabiliteit, parametrische sensitiviteit, *wrong-way behavior*
- Transportverschijnselen: inleiding, reactie en transport in serie, reactie en transport simultaan, combinatie van uitwendige en inwendige transportlimiteringen
 - toepassing op heterogeen gekatalyseerde reacties, effectieve diffusie concept, Thiele modulus en *effectiveness factor*
 - toepassing op gas-vloeistof reacties, film- en surface renewal modellen, chemische versnelling, Hatta kental, oneindige versnellingsfactor, Achterlandverhouding
- Lab-reactoren en experimentele studie van de kinetiek van heterogeen gekatalyseerde reacties
 - inleiding, reactortypes, differentieel versus integraal bedrijf, criteria voor de verwaarloosbaarheid van transporteffecten op korrelschaal, constructie van reactiesnelheidsvergelijkingen
 - parameterschattingen toegepast op reactiekinetiek opgemeten in vastbedreactoren: Variantieanalyse, Levenberg-Marquardt procedé, reparameterisering, modeldiscriminatie en experimenteel ontwerp
- Industriële buisreactoren: inleiding en overzicht uitvoeringsvormen, reactor selectie, modelvergelijkingen, fysische en model parameters en hun typische waarden voor industriële toepassing
- Reactoren met gepakt katalysatorbed: modelclassificering, ideaal pseudohomogeen ééndimensionaal model, pseudohomogeen ééndimensionaal model met effectieve axiale diffusie en dispersie, pseudohomogeen tweedimensionaal model voor propstroming met effectieve radiale diffusie en geleiding, keuze van warmte-transport parameters, ééndimensionaal heterogeen model
- Gasvloeistofreactoren: inleiding en overzicht van industriële uitvoeringsvormen, keuze van de gedispergeerde fase, gas- en vloeistoffase perfect gemengd, gas- en vloeistoffase in propstroming, co- versus countercurrent contact, fysische en model parameters en hun typische waarden voor industriële toepassing, sijnbedreactoren, slurry reactoren, Hatta getal en de diverse stromingsregimes binnen gas-vloeistof reactoren en chemische absorbtietoren
- Reactoren met gefluidiseerd bed: inleiding en overzicht industriële uitvoeringsvormen, fluidisatieverschijnsel, fluidisatieregimes, tweefasenmodel voor reactoren met gefluidiseerd bed, minimale fluidisatie snelheid, terminale snelheid
- Responsiecollege: vragenles
- Werkcolleges
 - Isotherme reactoren
 - Stoichiometrie, thermodynamica en kinetiek
 - Niet-isotherme reactoren
 - Transportfenomenen
 - Laboschaalreactoren en vastbedreactoren
- Integratieseminarie
 - Schatting van intrinsieke kinetiek in vastbedreactoren
- Projecten en groepswork
 - Simulatie van een tubulaire reactor

- Microteaching:
 - Case study 1: Levenspiel genie
 - Case study 2 vanuit de industriële praktijk over analyseren van verblijftijdspreiding en reactor ontwerp
 - Case study 3 vanuit de industriële praktijk over optimalisatie van de vorm en grootte van een katalysator deeltje in een bestaande multi-tubular reactor voor een endotherme reactie
 - Case study 4 vanuit de industriële praktijk over het ontwerp van de reactie sectie en operationele strategie in het geval van een deactiverende katalysator

Begincompetenties

Dit opleidingsonderdeel bouwt verder op bepaalde eindcompetenties van de opleidingsonderdelen Informatica, Wiskundige analyse I: functies van één veranderlijke, Meetkunde en lineaire algebra, Warmtetechniek en stoftransport, Inleiding tot de numerieke wiskunde, Basiswiskunde

Eindcompetenties

1 KENNIS: BEGRIPPEN

Het definiëren van: verblijftijdsverdeling, stoichiometrische coëfficiënten, vorderingsgraad, sleutelcomponent, affiniteit, maximale isobare adiabatische temperatuurstijging, benuttingsgraad, versnellingsfactor, Thiele-modulus, effectieve diffusie, Hatta-getal, Peclet kental, Damkohler getallen, intrinsieke kinetiek, axiale en radiale menging, interne en externe gradiënten, fluïdisatie, bellenvorming, effectieve dispersie, micromenging, macromenging, segregatie, regressie, parameterschatting in labreactoren, Ergun drukvalvergelijking

2 KENNIS: INZICHTEN

Het afleiden, berekenen, verklaren en voorspellen van: effect van niet-isothermiciteit op gedrag van verschillende types reactoren, diffusie ten overstaan van reactie, fysische betekenis van parameters in modelvergelijkingen

3 KENNIS: RELATIES

Het afleiden, berekenen, verklaren en voorspellen van: het effect van niet-ideale stromingspatronen op reactorgedrag, temperatuurafhankelijkheid van reactie-enthalpie en chemisch evenwicht, analogie tussen stof- en warmteoverdracht, analogie tussen reactie en stoftransport in katalysatoren en gas-vloeistof reactoren

4 KENNIS: MODELLEN

Het definiëren van: pseudohomogene modellen, heterogene modellen en één dimensionale heterogene tweefasen modellen

5 VAARDIGHEDEN: METHODES

- Het bepalen van het aantal globale reacties om een gegeven voeding tot gevraagde producten om te zetten
- Het verkrijgen van laboschaalgegevens die leiden tot reactiesnelheidsvergelijkingen geschikt voor reactorontwerp
- Het inschatten van het belang van transport en overdracht van stof en/of energie
- Het opstellen van ontwerpvergelijkingen en afschatten van de hierin optredende transportparameters
- Het afleiden van de reactorontwerpvergelijkingen startende van de behoudswetten van massa en energie voor industriële reactoren
- Het oplossen van de meest voorkomende en de meest eenvoudige ontwerpvergelijkingen
- Het afbakenen van bedrijfsvoorwaarden en het ontwerpen van een reactor vanuit thermodynamische overwegingen
- Het inschatten en rekening houden met afwijkingen van ideale stromingspatronen

6 VAARDIGHEDEN: HEURISTIEKEN:

- Het inschatten van grootteordes van voor het reactorontwerp belangrijke grootheden
- Het inschatten van criteria voor reactor(model) keuze en het bepalen van de optimale reactorconfiguratie
- Het toepassen van regels voor opschaling van reactoren

7 VAARDIGHEDEN: PROCEDURES:

- Het vanuit reactiemechanismen opstellen van reactiesnelheidsvergelijkingen geschikt voor reactorontwerp

Creditcontractvoorwaarde

Toelating tot dit opleidingsonderdeel via creditcontract is mogelijk na gunstige beoordeling van de competenties

Examencontractvoorwaarde

Dit opleidingsonderdeel kan niet via examencontract gevolgd worden

Didactische werkvormen

Groepswerk, Werkcollege, Hoorcollege, Zelfstandig werk, Peer teaching

Toelichtingen bij de didactische werkvormen

- De hoorcolleges omvatten de theorielessen aangevuld met talrijke voorbeelden alsook een responsiecollege (vraag- en antwoordsessie over de gedoeerde stof).
- In de werkcolleges wordt de theorie geïllustreerd aan de hand van geleide computer oefeningen met behulp van Maple.
- Het integratieseminarie is een interactieve begeleide leersituatie, met nadrukkelijke integratie van inhoud uit verschillende opleidingsonderdelen/vakgebieden (zie situering) en kennisbronnen (e.g. Perry's Chemical Engineers' Handbook, NIST Database, web tools, ...). Dit omvat discussie, oefeningen, korte opdrachten, etc.
- In het project wordt de nadruk gelegd op kennisintegratie van individuele opleidingsonderdelen (e.g. 'Inleiding tot de numerieke wiskunde (E002910)' en 'Informatica (E015040)') en hoorcolleges, met als eindresultaat een *verslag* (interpretatie van computersimulaties). Het *verslag* wordt geschreven door groepen van 4 à 5 studenten (zie evaluatie).

Studiemateriaal

Type: Syllabus

Naam: Dictaat Chemische Reactoren
 Richtprijs: Gratis of betaald door opleiding
 Optioneel: nee
 Taal : Engels
 Aantal pagina's : 300
 Oudst bruikbare editie : AJ 2023-2024
 Beschikbaar op Ufora : Ja
 Online beschikbaar : Nee
 Beschikbaar in de bibliotheek : Nee
 Beschikbaar via studentenvereniging : Nee

Referenties

Vakinhoudelijke studiebegeleiding

Docent en assistent zijn beschikbaar na afspraak voor extra toelichting bij de cursus en feedback op de evaluaties

Evaluatiemomenten

periodegebonden en niet-periodegebonden evaluatie

Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de eerste examenperiode

Mondelinge evaluatie, Schriftelijke evaluatie

Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de tweede examenperiode

Mondelinge evaluatie, Schriftelijke evaluatie

Evaluatievormen bij niet-periodegebonden evaluatie

Participatie, Werkstuk

Tweede examenkans in geval van niet-periodegebonden evaluatie

Examen in de tweede examenperiode is niet mogelijk

Toelichtingen bij de evaluatievormen

Periodegebonden: gesloten boek, theorie: mondelinge toelichting met schriftelijke voorbereiding, oefening: enkel schriftelijke voorbereiding.
 Niet-periodegebonden: groepsverslagen, participatie (aanwezigheid) gedurende microteaching/groepswerk/peerteaching/industriële case studies (elke 0.75

(Goedgekeurd)

maand). Gevolgen van een ongegronde afwezigheid zijn nulcores enkel op het participatiegedeelte (i.e. een maximale impact van 1 punt op 20 op de globale eindscore).

Eindscoreberekening

Bijzondere voorwaarden: niet-periodegebonden: 3/20, periodegebonden: 12/20 op theorie en 5/20 op oefeningen.