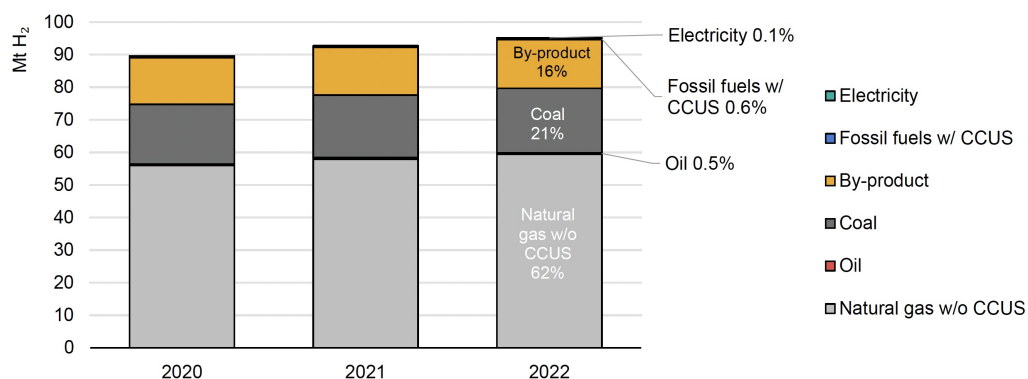


Production d'hydrogène par reformage catalytique de méthane et captage de CO_2 dans un réacteur

Introduction aux méthodes numériques et projet
Première année de bachelier ingénieur civil, Université de Liège
Année académique 2023-2024

1 Introduction

L'hydrogène est perçu comme un vecteur énergétique actuellement prometteur tout comme l'électricité mais contrairement aux sources primaires d'énergie, il doit être fabriqué. Son principal attrait vient du fait que la molécule d'hydrogène se combine aisément à l'oxygène de l'air pour fournir de l'énergie et de l'eau. Son utilisation dans les piles à combustible permet d'alimenter des moteurs électriques qui peuvent assurer seuls la propulsion d'un véhicule. Des différentes sources utilisées pour produire l'hydrogène, le gaz naturel en est la principale (figure 1). Le reformage catalytique du méthane en hydrogène constitue



IEA. CC BY 4.0.

Note: CCUS= carbon capture, utilisation and storage.

Global hydrogen production grew by 3% in 2022 to reach 95 Mt, but low-emission hydrogen production accounted for less than 1% of all production.

FIGURE 1 – Sources utilisées pour la production d'hydrogène (International Energy Agency, Global Hydrogen Review 2023)

une activité importante de la production industrielle d'hydrogène. Par contre, certains inconvénients comme le vieillissement du catalyseur utilisé et la formation importante du

monoxyde de carbone (gaz poison pour les piles à combustible) rendent cette technologie assez limitée. Il est donc important de modéliser ce type de procédé afin de pouvoir l'améliorer par le développement de nouvelles formulations de catalyseurs, atteindre une sélectivité suffisante en produits désirés, et réduire la production de gaz à effet de serre. Ces derniers peuvent être captés ou séquestrés par carbonatation à la sortie du procédé (CCUS : Carbon Capture, Utilisation and Storage).

Dans le cadre de ce projet, nous allons modéliser un système de reformage catalytique du méthane en hydrogène couplé avec une séquestration du CO_2 par carbonatation afin d'améliorer la production d'hydrogène et de diminuer la production de gaz à effet de serre.

2 Principe du reformage du méthane en hydrogène

Le schéma présenté à la figure 2 illustre le principe de reformage du méthane en hydrogène dans un système catalytique. Au cours du reformage, le méthane réagit avec de la vapeur d'eau (comme principal agent d'oxydation) sur un catalyseur, suivant la réaction 1, pour former de l'hydrogène et du monoxyde de carbone. Une deuxième étape dite de Water-Gas-Shift (WGS) transforme le CO en CO_2 avec une production supplémentaire d'hydrogène, selon la réaction 3 et la combinaison des deux réactions conduit à la réaction 2. La réaction de reformage est une réaction très endothermique et nécessite des conditions de température assez élevées afin d'atteindre un bon rendement.

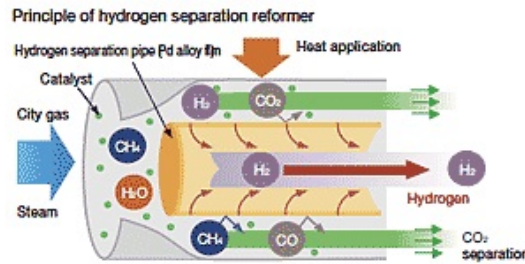
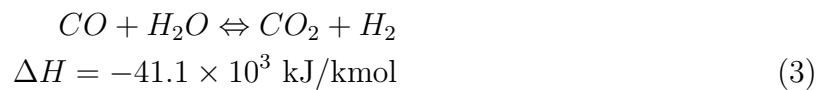
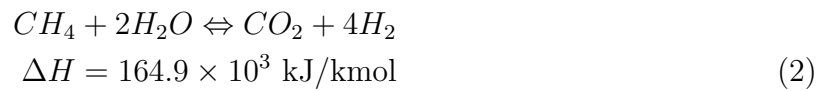
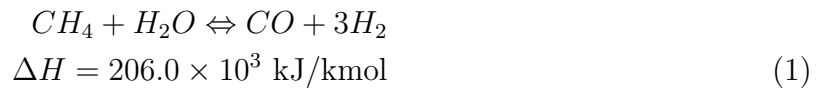


FIGURE 2 – Illustration du reformage de méthane en hydrogène avec catalyseur



Le catalyseur, par définition, permet d'accélérer une réaction. Il y participe mais n'entre pas dans son équation-bilan. Dans le reformage du méthane, le catalyseur permet de diminuer la température de la réaction, et ainsi d'éviter le domaine de température favorable à des réactions parasites. Lorsqu'un catalyseur est utilisé pour cette réaction, le support doit présenter une surface spécifique permettant de bien disperser les particules de la phase active pour réagir avec le méthane. Le nickel est communément employé dans les catalyseurs industriels car il représente un bon compromis entre les coûts et l'efficacité.

3 Vitesses des réactions de reformage du méthane en hydrogène

Les vitesses de réaction R_i en $\text{kmol kg}^{-1}\text{s}^{-1}$ des équations de reformage dépendent des pressions partielles P_i (bar) des espèces chimiques et peuvent être modélisées suivant les trois équations suivantes correspondant respectivement aux vitesses des réactions 1 à 3

$$R_1 = \frac{k_1}{P_{H_2}^{2.5}}(P_{CH_4}P_{H_2O} - \frac{P_{H_2}^3 P_{CO}}{K_1})/DEN^2 \quad (4)$$

$$R_2 = \frac{k_2}{P_{H_2}^{3.5}}(P_{CH_4}P_{H_2O}^2 - \frac{P_{H_2}^4 P_{CO_2}}{K_2})/DEN^2 \quad (5)$$

$$R_3 = \frac{k_3}{P_{H_2}}(P_{CO}P_{H_2O} - \frac{P_{H_2} P_{CO_2}}{K_3})/DEN^2 \quad (6)$$

$$DEN = 1 + K_{CO}P_{CO} + K_{H_2}P_{H_2} + K_{CH_4}P_{CH_4} + K_{H_2O}P_{H_2O}/P_{H_2} \quad (7)$$

Les constantes d'équilibre K_i des réactions 1 à 3 se définissent en bar^2 ($i = 1, 2$) et sont sans dimension pour $i = 3$. Elles dépendent de la température et sont données en annexe. Les constantes de vitesse k_i des réactions 1 à 3 sont données en $\text{kmol bar}^{0.5} \text{kg}^{-1} \text{s}^{-1}$ pour $i = 1, 2$ et en $\text{kmol kg}^{-1} \text{s}^{-1} \text{bar}^{-1}$ pour $i = 3$. Les constantes d'adsorption K_j des composés $j = CO, H_2, CH_4$ sont en bar^{-1} et sans dimension pour $j = H_2O$. Elles sont également fournies en annexe par les relations d'Arrhenius. Les pressions partielles des espèces i peuvent être calculées à partir de la pression totale, du nombre de moles F_i de l'espèce i considérée et du nombre de moles total F_{tot} : $P_i = P \frac{F_i}{F_{tot}}$. Les taux de formation ou de consommation des espèces i en $\text{kmol kg}^{-1} \text{s}^{-1}$ se calculent comme suit

$$r_{CH_4} = -R_1 - R_2 \quad (8)$$

$$r_{H_2O} = -R_1 - 2R_2 - R_3 \quad (9)$$

$$r_{H_2} = 3R_1 + 4R_2 + R_3 \quad (10)$$

$$r_{CO} = R_1 - R_3 \quad (11)$$

$$r_{CO_2} = R_2 + R_3 \quad (12)$$

4 Réaction de carbonatation

Afin de capturer le CO_2 lors de la réaction de reformage, l'utilisation d'oxyde de calcium CaO sous forme de pellet (figure 3) de faible dimension permet d'obtenir une réaction de carbonatation :

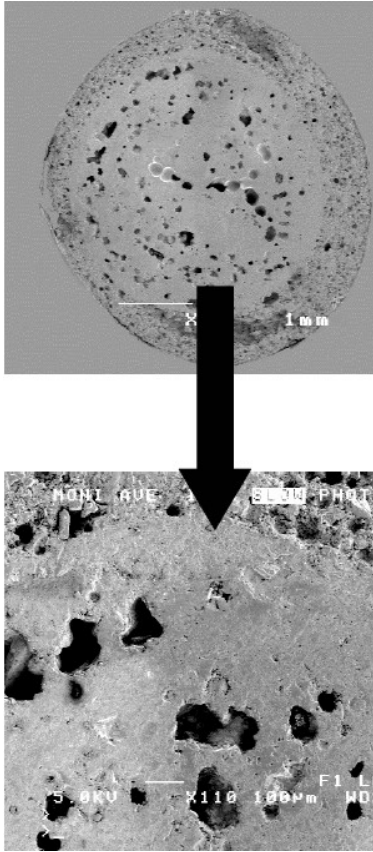
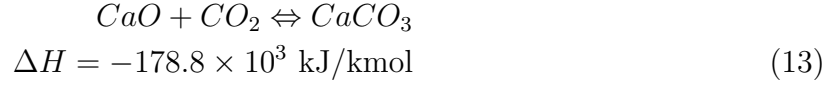


FIGURE 3 – Image au microscope électronique d'un pellet CaO agrandie 17 fois puis 1000 fois

La cinétique de la carbonatation dépend du type de pellets de CaO utilisé et en particulier, de leur taille, de leur surface spécifique ainsi que de leur porosité. On définit k_c et b comme étant respectivement la vitesse apparente de carbonatation en s^{-1} et le temps (s) pris pour arriver à la moitié de la conversion ultime X_u . Ces deux paramètres sont des fonctions dépendantes de la température T (Kelvins) et de forme générale :

$$k_c(T) = M_k e^{\frac{N_k}{T}} \quad (14)$$

$$b(T) = M_b e^{\frac{N_b}{T}} \quad (15)$$

où M_k , M_b , N_k et N_b sont des constantes à déterminer en fonction du type de pellets. Elles sont données en annexe.

5 Modélisation

Les équations régissant le système de reformage du méthane couplé à un système de piégeage du CO_2 peuvent s'écrire en considérant des bilans de masse et énergétique. Le modèle que l'on va étudier dans le cadre de ce projet est celui d'un réacteur tubulaire de diamètre intérieur D_R rempli de particules solides de catalyseur à base de nickel de diamètre d_p et de pellets de CaO constituant un lit mobile où le gaz d'entrée réagit pour fournir de l'hydrogène suivant les réactions 1 à 3 (figure 4). Le modèle admet comme

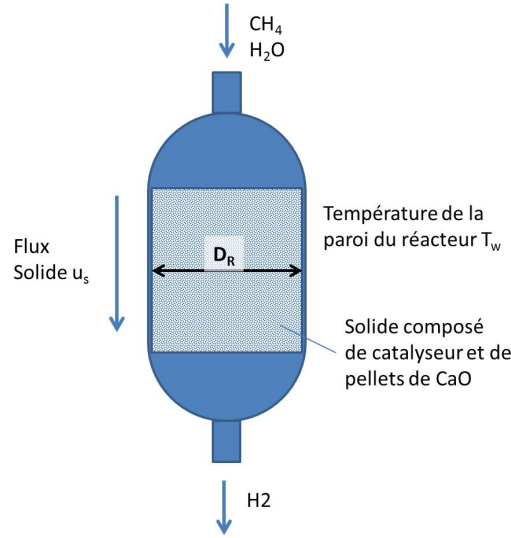


FIGURE 4 – Schéma d'un réacteur à lit mobile

hypothèses de considérer un flux axial uniquement, un comportement de gaz idéal, un profil de température et de concentration constants radialement, une porosité constante, une taille uniforme des particules catalytiques, et une température constante de la paroi du réacteur. Le bilan de masse en régime stationnaire peut alors s'écrire :

$$\frac{du_g C_i}{dz} = \eta(1 - \epsilon)\rho_{cat}r_i - (1 - \epsilon)\rho_{CaO}r_{cbn} \quad (16)$$

où u_g est la vitesse superficielle¹ du gaz à travers le réacteur en m/s, C_i la concentration molaire des espèces i en kmol/m³, ϵ la porosité du réacteur, η l'efficacité du catalyseur, ρ_{cat}

1. La vitesse superficielle u_{sup} dans un système multiphasé se définit comme la vitesse d'une des phases si celle-ci était la seule circulant à travers une section donnée du système : $u_{sup} = \epsilon v$ où v est la vitesse d'advection de la phase considérée. $u_{sup} = Q/A$ où Q est le débit en m³/s et A l'aire de la section considérée en m².

et ρ_{CaO} sont respectivement les masses volumiques du catalyseur des pellets de CaO en kg/m^3 . Le taux de consommation r_{cbn} de CO_2 par carbonatation en $\text{kmol kg}^{-1} \text{s}^{-1}$ peut être défini en fonction de la conversion fractionnaire X du CaO en $CaCO_3$ (sans dimensions). Pour obtenir le profil axial de la conversion fractionnaire X de CaO , le bilan de masse est donné par

$$\frac{dX}{dz} = \frac{M_{CaO}}{u_s} r_{cbn} \quad (17)$$

où u_s est la vitesse linéaire en m/s du lit mobile le long du réacteur. r_{cbn} est donné par

$$r_{cbn} = \frac{k_c}{M_{CaO}} \left(1 - \frac{X}{X_u}\right)^2 \quad (18)$$

où M_{CaO} est le poids moléculaire de CaO en kg/kmol et $X_u = k_c b$ la conversion fractionnaire ultime.

Le bilan énergétique simplifié du système dépend de la chaleur du système poreux que forme les catalyseurs, des chaleurs de réaction des réactions (1), (2), (3) et (13) ainsi que du transfert de chaleur à travers le tube du réacteur. Pour le réacteur tubulaire de diamètre intérieur D_R , il s'écrit

$$\begin{aligned} & [(1 - \epsilon)\rho_s u_s C_{ps} + \rho_g u_g C_{pg}] \frac{dT}{dz} = \\ & -(1 - \epsilon)\rho_{cat} \sum_j \eta R_j H_{Rj} - (1 - \epsilon)\rho_{CaO} r_{cbn} H_{cbn} + h_W (T_W - T) \frac{4}{D_R} \end{aligned} \quad (19)$$

où ρ_s est la masse volumique moyenne (kg/m^3) des deux solides au sein du réacteur et est donnée par $\rho_s = (W_{cat} + W_{CaO}) / (W_{cat}/\rho_{cat} + W_{CaO}/\rho_{CaO})$. T_W est la température en Kelvins de la paroi du réacteur égale à la température à l'entrée du réacteur. W_{cat} et W_{CaO} sont les flux massiques (kg/h) respectifs des catalyseurs et des pellets de CaO contenus dans le réacteur. ρ_g est la masse volumique de la phase gazeuse² et C_{ps} et C_{pg} sont les capacités thermiques (kJ/kmol K) du solide et du gaz. H_{Rj} dénotent les chaleurs des réactions (1) à (3) et H_{cbn} la chaleur de la réaction de carbonatation (13) en kJ/kmol .

La distribution axiale de pression suit l'équation d'Ergun :

$$\frac{dP}{dz} = -\frac{\rho_g u_g^2}{d_p} \frac{1 - \epsilon}{\epsilon} \left(\frac{150(1 - \epsilon)\mu}{d_p \rho_g u_g} + 1.75 \right) \times 10^{-5} \quad (20)$$

où μ est la viscosité.

Question 1 : Recherche de racines

A la fin du projet (Question 4), nous aurons besoin de résoudre une équation non-linéaire. La première question du projet vise à implémenter deux méthodes de recherche

2. La masse volumique de la phase gazeuse est donnée par $\frac{1}{RT} \sum_i (M_i P_i)$ avec M_i la masse molaire du composé i et P_i sa pression partielle en Pascal (1bar = 100000 Pa).

de racine qui ont été vues au cours théoriques, à savoir la méthode de la bisection et la méthode de la sécante. Ces implémentations doivent être le plus générique possible et donc pouvoir fonctionner pour tout type de fonction et avec le moins d'hypothèses de départ possibles. On demande d'implémenter dans un module `RechercheRacine` les deux fonctions

```
x, statut = secante(f, x0, x1, tol)
```

et

```
x, statut = bisection(f, x0, x1, tol)
```

qui permettent de rechercher la racine d'une fonction Python $f(x)$, avec une tolérance définie par la valeur `tol`, à partir de deux valeurs initiales `x0` et `x1` selon la méthode de la sécante et de la bisection. Il est primordial de respecter le format demandé ci-dessus étant donné que ces fonctions seront testées automatiquement. En sortie, les deux fonctions doivent retourner un objet de type "list" avec deux valeurs. Dans le cas où la recherche a correctement convergé et donne une approximation de la racine à la tolérance près, la première valeur `x` contient la valeur de la racine et la deuxième valeur `statut` contient la valeur 0. Dans le cas où l'utilisateur a rentré deux valeurs qui ne satisfont pas les hypothèses de la méthode, il vous est demandé d'afficher un message d'erreur et d'affecter à la variable de sortie `statut` la valeur 1. Dans ce cas, `x` contient n'importe quelle valeur. Dans le cas où la méthode de la recherche de racine ne converge pas (par exemple parce que la fonction n'a pas de racine), vous devez afficher un message d'erreur et affecter la valeur `-1` à la variable `statut`. Dans ce cas, à nouveau, n'importe quelle valeur peut être affectée à la variable de sortie `x`.

Dans votre implémentation, prenez soin (i) de vérifier les hypothèses de chacune de ces méthodes et de prévoir un comportement adéquat du code dans le cas où ces hypothèses ne sont pas rencontrées, de manière à fournir une réponse adaptée dans un maximum de cas, (ii) de veiller à réduire autant que possible le nombre d'appels de la fonction $f(x)$ à l'intérieur des fonctions `secante` et `bisection`, et ce pour des raisons d'efficacité. L'utilisation du profiler de `Spyder` vous permettra d'analyser l'efficacité de votre code.

Question 2 : Mise en place de la modélisation

Cette seconde partie consiste à établir le modèle numérique permettant d'effectuer la simulation du système. On supposera que les gaz se comportent comme des gaz parfaits.

1. Définir dans Python une fonction `odefuction` qui reçoit en arguments la distance axiale z et les valeurs courantes des huit variables d'état

$$C = [C_{CH_4}, C_{H_2O}, C_{H_2}, C_{CO}, C_{CO_2}, X, T, P]^T$$

et fournit la dérivée $\frac{dC}{dz}$.

2. Une fois cette fonction implémentée, nous pouvons résoudre le système d'équations différentielles qui calcule les variables d'état en fonction de la distance axiale. Pour ce faire, il vous est demandé de :

- Implémenter vous-mêmes la méthode d'Euler explicite. On demande de programmer cette méthode dans un module `SimReacteur` sous la forme d'une fonction

`z, C = calculConcentrationsEuler([z0,zf], C0)`

où `[z0,zf]` est l'intervalle de résolution, `C0` est un array de taille 8 reprenant concentrations initiales en `z0`. La sortie est un objet de type "list" composé des variables `z` et `C`. `z` est un array de n points où la solution numérique est évaluée (n n'est pas imposé), `C` est un array de taille $8 \times n$ contenant les valeurs des concentrations en chaque point. Toutes les concentrations sont exprimées en kmol/m^3 .

- Utiliser la fonction `solve_ivp` de la librairie `SciPy`. Comme à la question précédente, la résolution doit être programmée dans le module `SimReacteur` sous la forme d'une fonction

`z, C = calculConcentrationsIVP([z0,zf], C0)`

- Effectuer une comparaison des différents solveurs d'équations différentielles ordinaires.
- Sur base de cette étude, justifiez un choix de solveur et de paramètres.

Prenez comme concentration totale en gaz à l'entrée de $1 \text{ mole}/22.4 \text{ L}$ correspondant aux conditions normales de température et de pression³, un ratio molaire H_2O/CH_4 de 3, et 0 pour les autres espèces, une température d'entrée de 700°C et une pression de 3 bar. Prenez une vitesse d'entrée de gaz u_g de 1 m/s et des solides u_s de 10^{-3} m/s . Tracer l'évolution le long d'un réacteur de 0.29 m de long et de diamètre interne 0.024 m des huit variables pour une longueur en mettant les concentrations sur un graphe et X , T et P sur un autre.

Question 3 : Etude du réacteur

Pour les situations suivantes, représenter l'évolution de la composition du gaz sec (sans H_2O) et de la température.

1. Comparer un système de réacteur avec et sans capture du CO_2 .
2. Analyser l'effet d'un flux d'entrée de CaO plus important en faisant varier la vitesse u_s .
3. Analyser l'effet d'un flux de gaz plus important en faisant varier la vitesse u_g .
4. Analyser l'effet d'une composition de gaz d'entrée différente.

3. Dans l'hypothèse des gaz parfaits, 1 mole correspond à 22.4 L aux conditions normales ($T = 273.15 \text{ K}$, $P = 1 \text{ bar}$). La loi des gaz parfaits est : $PV = nRT$, où P est la pression en Pa, V le volume en L, n le nombre de moles, R la constante des gaz parfaits et T la température en Kelvins.

Question 4 : Optimisation du fonctionnement

1. Créez une fonction qui, pour un flux d'entrée de gaz donné u_g et une composition d'entrée donnée de gaz, dans des conditions de pression et de température données, détermine le flux de CaO u_s de telle sorte que la concentration en CO_2 du gaz reformé à l'état sec soit de Y %, à la position axiale dans le réacteur la plus proche de la sortie.
2. Appliquez la fonction créée ci-dessus pour trouver u_s qui fournit une concentration en CO_2 du gaz reformé à l'état sec de 7.5% pour les conditions initiales de la question 2.
3. Comment varie le flux u_s optimal trouvé ci-dessus avec la température d'entrée ?

Annexes

Réaction de reformage du méthane

Les constantes d'équilibre K_i dépendent de la température T en Kelvin et sont données par :

$$K_1 = 4.707 \times 10^{12} \exp[-224000/(RT)]$$

$$K_2 = K_1 \times K_3$$

$$K_3 = 1.142 \times 10^{-2} \exp[37300/(RT)]$$

Les constantes de vitesse k_i ($\text{kmol bar}^{0.5} \text{ kg}_{\text{cat}}^{-1} \text{ s}^{-1}$ pour k_1 et k_2 et $\text{kmol kg}_{\text{cat}}^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ bar}^{-1}$ pour k_3) des réactions 1 à 3 sont données par

$$k_1 = 1.842/3600 \times 10^{-4} \exp[(-240100/R) * (1/T - 1/648)]$$

$$k_2 = 2.193/3600 \times 10^{-5} \exp[(-243900/R) * (1/T - 1/648)]$$

$$k_3 = 7.558/3600 \exp[(-67130/R) * (1/T - 1/648)]$$

et les constantes d'adsorption K_j (bar^{-1}) sont données par les relations d'Arrhenius.

$$K_{CH_4} = 0.179 \exp[(38280/R) * (1/T - 1/823)]$$

$$K_{H_2O} = 0.4152 \exp[(-88680/R) * (1/T - 1/823)]$$

$$K_{H_2} = 0.0296 \exp[(82900/R) * (1/T - 1/648)]$$

$$K_{CO} = 40.91 \exp[(70650/R) * (1/T - 1/648)]$$

où $R = 8.314 \text{ J mol}^{-1} \text{ Kelvin}^{-1}$ est la constante universelle des gaz parfaits.

Bilan énergétique du réacteur

Le coefficient de transfert de chaleur h_W à travers la paroi du réacteur est donné par :

$$h_W = \begin{cases} 2.03(\frac{k_g}{D_R})Re_p^{0.8}\exp(-\frac{6d_p}{D_R}), & \text{si } 20 < Re_p, \text{ et si } 0.05 < \frac{d_p}{D_R} < 0.3. \\ 6.15(\frac{k_z^0}{D_R}), & \text{si } Re_p < 20. \end{cases} \quad (21)$$

avec

$$Re_p = u_g \epsilon \rho_g d_p / \mu$$

et

$$k_z^0 = k_g[\epsilon + (1 - \epsilon)/(0.139\epsilon - 0.0339 + 2/3(k_g/k_s))]$$

où μ est la viscosité du gaz considéré, k_g et k_s respectivement les conductivités thermiques du gaz et du solide constituant le lit catalytique dans le réacteur. Dans le cas où les variables ne sont pas dans les conditions de l'équation 21, le modèle n'est plus valide et la simulation doit alors renvoyer un message d'erreur.

Paramètres du réacteur

Consignes

- Le travail comporte un code de calcul Python et un rapport d'une longueur de 10 pages maximum.
- Le code doit être correct et écrit par vous (ce que nous vérifierons à la présentation orale).
- Etant donné qu'un des objectifs du cours est la maîtrise des algorithmes numériques et de leur programmation en Python, il est interdit d'utiliser ChatGPT ou tout autre outil d'intelligence artificielle pour la création du code.
- Le code doit être soigné et commenté.
- Le code doit utiliser au maximum les possibilités vectorielles de `numpy`.
- Pour toute fonction, nous sommes susceptibles de vous demander de montrer un *profile* Python et de l'interpréter.

Critères d'évaluation

La note finale individuelle sera définie sur base de l'examen oral en prenant en compte la note de l'évaluation continue (milestones) ainsi que la note du rapport et du code Python. Un des objectifs principaux de ce cours étant l'apprentissage de la programmation des méthodes numériques en Python, il est indispensable que chaque étudiant et chaque étudiante réussisse l'examen oral, qui portera notamment sur la maîtrise de Python et de votre code, afin de réussir globalement.

Paramètres	Valeurs	Unité
C_{pg}	8.45	kJ/(kg K)
C_{ps}	0.98	kJ/(kg K)
d_p	$3 \cdot 10^{-3}$	m
D_R	$2.4 \cdot 10^{-2}$	m
k_g	$2.59 \cdot 10^{-4}$	kJ/(m s K)
k_s	$1 \cdot 10^{-3}$	kJ/(m s K)
M_{CaO}	56	kg/kmol
M_{CH_4}	16	kg/kmol
M_{H_2O}	18	kg/kmol
M_{H_2}	2	kg/kmol
M_{CO}	28	kg/kmol
M_{CO_2}	44	kg/kmol
W_{CaO}	$83.6 \cdot 10^{-3}$	kg/h
W_{cat}	$16.4 \cdot 10^{-3}$	kg/h
ϵ	0.5	
μ	$2.8 \cdot 10^{-3}$	Pa s
ρ_{CaO}	1620	kg/m ³
ρ_{cat}	1100	kg/m ³
η	0.3	
M_k	303	
N_k	-13146	
M_b	1.6	
N_b	5649	

TABLE 1 – Valeurs des paramètres et des propriétés à utiliser

Evaluation continue

Deux “milestones” permettront de vérifier votre état d’avancement en cours de projet.

- Vendredi 1er mars à 15h00 : vérification de la question 1 (fonctions **secante** et **bissection**).
- Vendredi 15 mars à 15h00 : vérification de la question 2.

Ces fonctions seront testées automatiquement avec Gradescope :

- L’accès à Gradescope se fait via eCampus, rubrique “outils du cours”.
- Il est primordial de respecter les consignes et le format demandé en termes de nom de fonction, de nom de module, de variables d’entrée et de sortie. Un non-respect des consignes sera sanctionné par une note de 0/10.
- Il est possible de charger un seul fichier Python ou une archive au format ZIP comprenant plusieurs fichiers.
- Seules les bibliothèques numpy, scipy et matplotlib sont autorisées.
- Les soumissions seront ouvertes à partir du mercredi à 12h00 et vous aurez droit à

5 tentatives de soumission avant l'échéance. Au-delà de 5 tentatives, une pénalité sera appliquée.

Rapport et code Python

Chaque groupe doit soumettre un rapport au format PDF et un fichier .zip comprenant les fichiers .py de votre programme sur Gradescope au plus tard pour le dimanche 7 avril à 23h59. Le nom du fichier .zip et le nom du fichier .pdf doivent respecter le format suivant : “NumeroGroupe_NomA_NomB_NomC.xxx” (exemple : l’archive “27_Dupond_Beckers_Bastin.zip” doit inclure le fichier “27_Dupond_Beckers_Bastin.pdf”).

- La longueur du rapport ne peut dépasser 10 pages et ne doit pas comporter d’introduction.
- Pour chaque question, les résultats obtenus doivent être illustrés.
- La justification des choix numériques est très importante. Pensez à expliquer les choix qui vous ont semblé cruciaux.
- La forme du rapport est prise en compte. Il est recommandé de suivre les règles de bonne pratique pour la réalisation d’un rapport scientifique qui sont présentées dans le podcast correspondant. Le nombre de pages étant limité, il est inutile de répéter l’énoncé. Allez donc à l’essentiel.
- La qualité du code (efficacité et soin) est également considérée dans l’évaluation.

Examen oral

L’examen oral est **individuel** et dure 10 minutes. Vous devez faire une démonstration du programme de votre groupe et répondre à des questions supplémentaires. Les éléments suivants seront pris en considération :

- la maîtrise de Python en tirant au sort dans une liste de questions disponibles avant l’examen ;
- la maîtrise du programme réalisé par votre groupe en tirant au sort dans une liste de questions disponibles avant l’examen (vous devez être capable d’exécuter le code, de le modifier et d’expliquer son fonctionnement) ;
- les justifications et éclaircissements par rapport aux choix réalisés et aux résultats présentés dans le rapport et dans le code ;
- la maîtrise des notions théoriques vues au cours en lien avec votre travail et la maîtrise générale du projet.

Deuxième session

Les groupes qui, en première session, ont obtenu pour le rapport et le code une note suffisante sont, s’ils le souhaitent, dispensés de remettre un nouveau code et un nouveau rapport lors de la session de septembre. Dans ce cas, seul l’oral doit être représenté et

compte pour 100% de la note finale. Pour les autres groupes, un nouveau code et un nouveau rapport doivent être remis 5 jours avant l'examen oral.