

# Couplage multiphysique (COMUL)



**Composante**  
École Nationale  
Supérieure  
d'Électrotechnique  
d'Électronique  
d'Informatique  
d'Hydraulique  
et des  
Télécommunications

En bref

> **Code:** N9EM17D

## Présentation

### Objectifs

- Simuler et analyser de manière approfondie (en lien avec les matières théoriques associées) des configurations de couplage entre hydrodynamique, transferts et réaction sur la base de simulations de type DNS : (i) transfert autour et au sein d'une particule de catalyseur dans un écoulement et (ii) traçage numérique d'un réacteur.
- Simplifier ces études par établissement de modèles phénoménologiques 1D utilisés en génie des réacteurs
- Mettre en œuvre une simulation multi-échelle sur une configuration de réacteur catalytique à lit fixe sur la base d'un couplage entre ces modèles 1D.

### Description

Mode d'enseignement : bureau d'études en 3 parties.

L'objectif de ce bureau d'études est donc de résoudre à l'aide du logiciel COMSOL Multiphysics les équations régissant l'hydrodynamique, les transferts et la réaction au sein d'un réacteur à lit fixe à une phase fluide. Ce problème est complexe du fait des différents phénomènes mis en jeu et des diverses échelles qu'il recouvre : de l'échelle moléculaire à l'échelle du réacteur. Le génie de la réaction introduit différents concepts pour pouvoir simplifier la description des phénomènes impliqués – parmi lesquels on peut citer le facteur d'efficacité pour corriger la vitesse de réaction par les limitations dues à la diffusion interne et au transfert externe, et le coefficient de dispersion axiale pour corriger l'écart de l'hydrodynamique réelle à l'écoulement piston (modèle d'écoulement

de fluide parfait). A l'aide de problèmes décrivant d'abord séparément les échelles du grain de catalyseur et du réacteur avant de réaliser leur couplage, ces différentes notions sont introduites et leur validité discutée par comparaison à des solutions « exactes » résolues à l'aide de l'outil COMSOL.

#### Programme/Contenu

- Couplage entre les phénomènes de transport (interne / externe) et la réaction à l'échelle d'une particule de catalyseur : simulation 2D axi « exacte » et détermination des processus limitants ; comparaison du facteur d'efficacité global résultant aux expressions simplifiées issues du génie de la réaction (modèle 1D diffusion-réaction de particule associé au modèle du film)
- Traçage numérique au sein d'un réacteur tubulaire (vide) en écoulement laminaire : introduction à la dispersion axiale et comparaison des régimes de dispersion de Taylor-Aris et d'écoulement ségrégué ; analyse de la Distribution des Temps de Séjour et détermination du coefficient de dispersion axiale équivalent ; comparaison des prédictions du modèle 1D piston-dispersion avec la solution « exacte » (en régime de Taylor-Aris)
- Couplage multi-échelles (grain de catalyseur / fluide interstitiel) au sein d'un réacteur catalytique à lit fixe.