

Proposition de stage de fin d'étude

Modélisation multi-échelle d'un écoulement réactionnel au sein d'un réacteur poreux sous COMSOL Multiphysics.

Type d'offre : Stage de fin d'étude (6 mois)

Financement : SIMTEC

Salaire : 1100 euros nets/mois– prime si résultats (critères à établir au départ)

Établissement d'accueil et lieu de travail : SIMTEC, 8 rue Duployé, Grenoble

Profil recherché:

- Etudiant en dernière année de cycle ingénieur, travailleur et brillant,
- Intérêt fort pour les mathématiques, la modélisation numérique et pour comprendre mathématiquement les sciences physiques,
- Capacités d'apprentissage rapide de nouveaux domaines scientifiques,
- Rigueur scientifique,
- **Aucune connaissance des phénomènes physiques modélisés n'est requise,**
- Maîtrise de l'anglais souhaitable.

Résumé du stage:

Le but du présent stage est de modéliser les phénomènes physico-chimiques ayant lieu lors de la synthèse d'un gaz au sein d'un réacteur chimique poreux, en vue d'apporter une connaissance fine des phénomènes physiques sous-jacents.

Lors de l'écoulement réactionnel d'une espèce gazeuse A dans un réacteur poreux constitué de microbilles de B en vue de générer une espèce C, une espèce parasite D peut s'adsorber à la surface de chaque grain de B, risquant d'écranter la réaction chimique d'intérêt et de pénaliser le rendement du procédé. Pour étudier cette perturbation et commencer à identifier les voies d'optimisation du procédé, le développement d'un modèle numérique multi-échelle est proposé.

Ce modèle est constitué :

- A l'échelle microscopique (grain) : modèle 1D sphérique d'évolution d'un grain B avec adsorption de D à sa surface et prise en compte de la migration de A adsorbé au travers de la couche de D (théorie du cœur rétrécissant). Cette thématique nécessite d'étudier la diffusion d'espèce chimique sur un maillage mobile, permettant de traduire les variations de volume du grain.

- A l'échelle macroscopique : modification de la porosité macroscopique du milieu poreux en fonction de la variation de volume microscopique de chaque grain et étude de l'influence sur l'écoulement macroscopique.

Les phénomènes physiques à considérer sont :

- L'écoulement des espèces chimiques sous formes gazeuses dans un milieu poreux. En fonction type d'écoulement, des équations de type Brinkman ou de Darcy sont à utiliser pour appréhender les vitesses d'écoulements et les pertes de charges,
- Evolution des espèces chimiques, adsorbées ou gazeuse, avec prise en compte des réactions chimiques. En tout, 5 espèces/phases sont à considérer.
- Les échanges thermiques : endothermie/exothermies dues aux réactions chimiques via les enthalpies réactionnelles et échanges énergétiques avec les milieux extérieurs.

Tout au long de son stage, le stagiaire sera accompagné par un permanent de SIMTEC pour lui expliquer la démarche à suivre, les équations à utiliser, les conditions aux limites à mettre en œuvre, les points pour valider le modèle. Ainsi, aucune connaissance physique de la part du stagiaire n'est requise *a priori*, mais un fort appétit de savoir, de compréhension et de capacité mathématiques sont indispensables.

L'outil de modélisation est le logiciel COMSOL Multiphysics.

Présentation de la société SIMTEC :

SIMTEC est un cabinet conseil d'ingénierie de modélisation, dont le cœur de métier est d'assister les Industriels dans leur démarche de Développement, de Recherche, et d'Innovation. *Via* une collaboration forte, en interactions continues, nous aidons nos clients à structurer leur R&D et à explorer scientifiquement de nouvelles pistes de travail apportées par leur expérience métier.

Nous sommes spécialisés dans les domaines suivants:

- Mécanique des fluides (écoulement turbulent, laminaire, diphasique, interaction fluide-structure)
- Mécanique des structures (viscoélasticité, hyperélasticité, plasticité)
- Electromagnétisme (champ électromagnétique, induction)
- Echanges thermiques (conduction/convection/rayonnement)
- Génie des procédés, électrochimie

Notre offre de service réside en trois points :

- Sous-traitance en modélisation : le client décrit sa thématique avec ses mots « métiers », que nous traduisons en équations mathématiques (EDP) que nous résolvons sous COMSOL Multiphysics.
- Formation sur-mesure : nous construisons des formations à COMSOL Multiphysics sur mesure, adaptée aux besoins de nos clients. En quelques jours, le client devient capable d'être efficace et quasi-autonome sous COMSOL Multiphysics.

- Accompagnement à la modélisation : nous assistons nos clients dans le développement de leur modèle, en leur apportant un regard critique expert sur leurs travaux de modélisation.

SIMTEC est la première société consultant certifiée COMSOL en France.

Contexte de travail :

- Environnement intellectuel stimulant et international
- Milieux scientifiques de haute technologie
- Occasions de découvrir et d'approfondir ses connaissances en mécanique des fluides compressible et en génie des procédés.
- Opportunités d'évolution chez SIMTEC ou en thèse
- Atmosphère de travail soucieuse du développement personnel

Les plus du PFE :

- Possibilité de continuer en thèse si résultats satisfaisants,
- Apprentissage de nombreux domaines de la physique.

Si intéressé : CV + lettre de motivation à patrick.namy@simtecsolution.fr