



Modélisation et simulations numériques



Niveau d'étude
BAC +5



ECTS
2 crédits



Composante
Faculté des
Sciences

En bref

- › **Date de début des cours:** 1 sept. 2021
- › **Langue(s) d'enseignement:** Français
- › **Méthode d'enseignement:** En présence
- › **Organisation de l'enseignement:** Formation initiale
- › **Ouvert aux étudiants en échange:** Non

TD : 9

Objectifs

Cette UE a pour objectif de donner aux étudiants de Master de Chimie les outils de modélisation et de simulation numérique dans une optique d'optimisation de l'élaboration de matériaux. Les étudiants seront confrontés à des études de cas et devront résoudre des problèmes de modélisation en utilisation des outils dédiés.

Présentation

Description

Le « design by modeling », également appelé « material by design » occupe une place de plus en plus prégnante dans la recherche académique et industrielle. Il s'agit d'allier les disciplines de la fabrication des matériaux et de la modélisation numérique pour optimiser l'élaboration des matériaux par des approches top-down ou bottom-up.

Cette UE vise ainsi à donner aux étudiants en Master 2 de Chimie des outils leur permettant d'appréhender les notions de modélisation et de simulation numériques à différentes échelles et à des niveaux de complexité croissante.

Volumes horaires* :

CM : 11

Les étudiants devront donc être capables de

- * Formaliser, simuler et analyser des Distributions de Temps de Séjour (DTS) dans un système donné,
- * Formaliser et simuler des opérations de transformation continue ou discontinue (flash, réaction chimique, échange de chaleur) à l'échelle du procédé industriel via des outils de simulation dédiés,
- * Résoudre des problèmes 0D (dans des réacteurs parfaitement agités) représentés par des équations différentielles ordinaires (ODE) via des outils de type tableur,
- * Formaliser et simuler des phénomènes de transferts couplés à des réactions chimiques à une échelle locale en utilisant des outils dédiés (de type code de calcul numérique),



Pré-requis nécessaires

- * Connaissance des phénomènes de transport matière/ chaleur par diffusion
- * Notions de base de Génie des Procédés
- * Connaissance des bases de la mécanique des fluides

Contrôle des connaissances

- * Examen terminal

Syllabus

- * Introduction à la modélisation et la simulation numérique, approches top-down et bottom-up
- * Modélisation 0D de la Distribution des Temps de Séjour dans un procédé
- * Modélisation 0D de systèmes réactifs dans des RPA via des outils de type tableur
- * Simulation de procédés via des outils dédiés
- * Modélisation et simulation à l'échelle locale via des outils de type code de calcul numérique

Informations complémentaires

Contact(s) administratif(s) :

Secrétariat Master Chimie

<https://master-chimie.edu.umontpellier.fr/>

Infos pratiques

Contacts

Responsable pédagogique

Denis BOUYER

✉ denis.bouyer@umontpellier.fr

Lieu(x)

➤ Montpellier - Triolet