

L'attività sarà mirata allo sviluppo di metodi di modellazione di reattori multi-tubolari per la messa a punto di strumenti di simulazione da adottare a supporto della progettazione e del passaggio di scala. Il risultato finale sarà un modello in grado di prevedere l'effetto della geometria e delle condizioni operative sulla produzione di metano e sull'efficienza dello scambio termico in una porzione rappresentativa di un reattore multi-tubolare. Il progetto verrà sviluppato con l'impiego del un codice di fluidodinamica computazionale (CFD). Per il lato reattore, si implementerà la cinetica chimica della reazione di interesse e si punterà l'attenzione sulla capacità di predire gli effetti dell'interazione tra cinetica chimica e fluidodinamica locale. Per il lato shell verranno analizzati diversi modelli di ebollizione e dinamica delle bolle e sarà identificato quello che garantisce il miglior equilibrio tra accuratezza e onerosità computazionale, al fine di prevedere lo scambio termico e l'evoluzione del fluido refrigerante.