

THESE: Contrat à durée déterminée

Étude de la cinétique chimique de la combustion d'hydrogène

Reference: CFD-2023-CUE-03

Équipe: CFD

Unité de recherche: Energetics and propulsion

Salaire: 33.6 K€/year (brut)

Durée: 36 mois - Début: De Février à Septembre 2024

Lieu: 42 avenue Gaspard Coriolis – 31057 Toulouse

Responsable: **Bénédicte Cuenot**

E-mails: cuenot@cerfacs.fr ; a.giusti@imperial.ac.uk

barleon@cerfacs.fr

Niveau requis: Master of science

HOST LABORATORY

Le Cerfacs est un centre de recherche fondamentale et appliquée spécialisé dans la modélisation et la simulation numérique. Grâce à ses ressources et à son expertise en informatique haute performance, il aborde des problèmes scientifiques et techniques majeurs dans la recherche publique et industrielle. Les équipes du Cerfacs développent des méthodes innovantes et des solutions logicielles pour répondre aux besoins des secteurs de l'aéronautique, de l'espace, du climat, de l'énergie et de l'environnement. Le Cerfacs travaille en étroite interaction avec ses sept partenaires : Airbus, le Cnes, EDF, Météo France, l'Onera, Safran et TotalEnergies.



JOB DESCRIPTION

Topic(s): Dynamique Moléculaire Combustion Hydrogen Plasma

Contexte:

L'importance croissante de la combustion de l'hydrogène dans le contexte de la décarbonisation, notamment dans les secteurs de l'aérospatiale et de la production d'énergie, est évidente. Les défis potentiels liés à l'instabilité de la combustion devraient émerger comme une préoccupation majeure avec ces nouveaux moteurs à hydrogène, tout comme cela a été le cas par le passé avec les moteurs à kérosène, en particulier lorsqu'on vise des régimes de combustion pauvre pour réduire les émissions de NOx. Pour relever ces défis, des solutions disruptives doivent être trouvées, accompagnées du développement d'outils numériques liant les fondamentaux à la physique appliquée.

Mission:

Ce projet vise à étudier la cinétique chimique de la combustion de l'hydrogène dans une gamme de conditions pertinentes pour des applications pratiques. L'étude sera basée sur des simulations de dynamique moléculaire et tentera d'évaluer et de quantifier les voies chimiques menant à :

- la formation de NOx
- la catalyse aux parois dans un système de combustion hydrogène-air.

L'étude sera réalisée en collaboration avec l'Imperial College et l'Université de Pennsylvanie. Des outils de simulation pour la dynamique moléculaire seront utilisés pour élaborer une cinétique de réaction à inclure dans les simulations CFD d'expériences à l'échelle du laboratoire. Des développements de la dynamique moléculaire réactive pourraient être nécessaires pour améliorer la précision et la robustesse des simulations. Les objectifs spécifiques du projet sont les suivants :

- comprendre et évaluer les émissions de NOx des systèmes à hydrogène
- comprendre et évaluer les effets catalytiques possibles aux parois des systèmes à hydrogène
- fournir une cinétique de réaction précise de la formation de NOx et de la catalyse aux parois dans la combustion de l'hydrogène et, selon les progrès du projet, dans la combustion assistée par plasma de l'hydrogène.

Résultats attendus :

- Nouvelles connaissances sur les chemins réactionnels, les barrières énergétiques de formation des oxydes d'azote et la catalyse aux parois dans les systèmes hydrogène-air
- Cinétique de la formation des oxydes d'azote et de catalyse aux parois dans les systèmes hydrogène-air
- Évaluation des effets de NOx et de catalyse dans des expériences à l'échelle du laboratoire avec la combustion de l'hydrogène et la combustion assistée par plasma à l'hydrogène.

Cette thèse fait partie du projet ICHARuS (DC2 - <https://icharus.eu/>), un réseau doctoral financé par la Communauté européenne dans le cadre du MSCA. Le projet rassemble des institutions de recherche de premier plan en Europe, des partenaires industriels et des universités internationales pour développer des technologies innovantes pour l'utilisation sûre et efficace de l'hydrogène dans les transports et la production d'énergie. Le candidat à la thèse participera à des activités de formation à l'échelle du réseau, des ateliers et des conférences, ainsi qu'à des périodes de détachement dans les laboratoires des partenaires du réseau.

Les candidatures doivent être soumises en suivant la procédure détaillée sur :
<https://euraxess.ec.europa.eu/jobs/177738>."

DESIRED PROFILE

Background required:

Numerical simulation | Chemical Physics | Programming Python/Fortran/C++

Abilities:

Capacity for analysis and synthesis

Innovation capacity

Ability to work independently

Relational qualities

Rigorous