

OFFRE D'EMPLOI – THESE
Modélisation de Décharge Plasma Hors Equilibre pour la Combustion d'Hydrogène

INFORMATIONS DE L'OFFRE

Référence : E&S-24-NB-01
Equipe : E&S

Lieu : 42 Avenue Gaspard Coriolis – 31057 Toulouse
Responsable : Florent Duchaine & Nicolas Barléon

Rémunération : 33 K€/an (brut)

Niveau requis : Master

Période : 3 ans - à partir du : 02/09/2024

Mots-clés : Mécanique Des Fluides Numériques ; Calcul Haute Performance ; Combustion ; Plasma ; Hydrogène

LE CERFACS

Le Cerfacs est un centre privé de recherche, de développement, de transfert et de formation en modélisation, simulation et calcul haute performance. Le Cerfacs conçoit, développe et propose des méthodes et solutions logicielles innovantes répondant aux besoins de ses associés dans les domaines de l'aéronautique, du spatial, du climat, de l'environnement et de l'énergie. Le Cerfacs forme des étudiants, des chercheurs et des ingénieurs dans le domaine de la simulation et du calcul haute performance.

Le Cerfacs travaille en forte interaction avec ses sept associés : [Airbus](#), [Cnes](#), [EDF](#), [Météo France](#), [Onera](#), [Safran](#) et [Total](#).



L'EQUIPE D'ACCUEIL - E&S

L'équipe Energie & Safety, anciennement équipe CFD-Combustion, se concentre sur des activités transversales visant à développer, optimiser et déployer des codes scientifiques dédiés aux calculs avancés de la combustion en géométries industrielles. L'équipe se focalise sur la simulation des écoulements en les appliquant aux avions, fusées, hélicoptères, moteurs de voitures, turbines, etc. Il en résulte des outils essentiels à de nombreux domaines applicatifs avec comme leitmotiv : calculons les systèmes avant de les construire. Plus spécifiquement, les membres de l'équipe développent des modèles et outils couvrant aussi bien la réduction de la chimie, la turbulence, la combustion, le diphasique, les instabilités de combustion... pour répondre aux challenges aussi bien académiques qu'industriels. De par son positionnement, l'équipe collabore avec de nombreux groupes scientifiques, des bureaux d'études des associés du Cerfacs, et les autres équipes du Cerfacs.

CONTEXTE

Un défi majeur pour notre société est de garantir l'accès à une énergie fiable avec un faible impact sur le climat et l'environnement. À cette fin, l'hydrogène produit de manière durable est une alternative sans carbone aux combustibles fossiles utilisés aujourd'hui. Cependant, l'utilisation de H₂ comme carburant nécessite l'adaptation des chambres de combustion actuelles afin de maximiser l'efficacité, de limiter les émissions d'oxydes d'azote (NO_x) et d'assurer la sécurité. Les réglementations sur les émissions de NO_x exigent l'utilisation d'une combustion prémélangée pauvre ou ultra-pauvre pour le H₂, ce qui pose des problèmes d'allumage et de stabilité de la flamme. L'objectif de cette thèse, dans le cadre du projet ANR-JETHPAC, est de développer l'utilisation des décharges plasma, plus particulièrement des décharges nanosecondes répétitives (NRPD), un ou une excellent(e) candidat(e) pour i) garantir un allumage rapide après l'injection de H₂ dans la chambre de combustion, et ii) contrôler les instabilités de combustion.

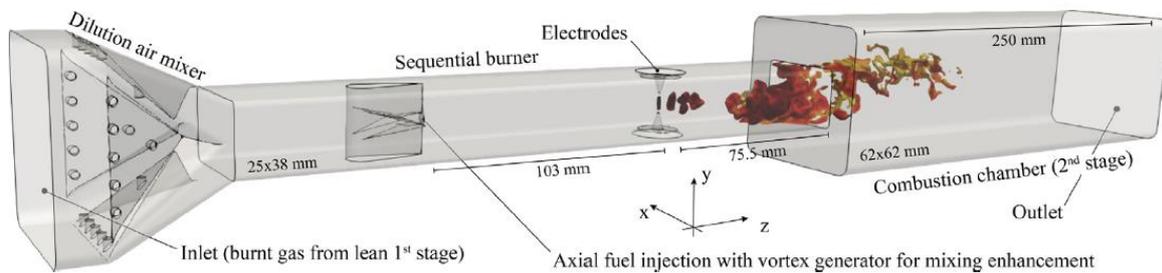
OBJECTIFS

L'objectif de cette thèse est de comprendre comment les décharges de plasma hors équilibre peuvent affecter la combustion de l'hydrogène, notamment en ce qui concerne l'allumage, la stabilisation de la flamme et les émissions de polluants. Pour cela, le travail a été divisé en trois étapes majeures, définies pour correspondre à la disponibilité des mesures du laboratoire CAPS de l'ETH Zurich.

Tout d'abord, un examen approfondi de la décharge dans un mélange H₂-air en écoulement sera réalisé à l'aide d'outils de chimie détaillée (Cantera et Arcane) [1] et du code AVBP avec son extension plasma [2,3]. Les outils de chimie seront utilisés pour identifier les principaux chemins réactionnels, sur la base de cas idéalisés, qui doivent être retenues dans un modèle chimique réduit pour la combustion de l'hydrogène assistée par plasma. D'autre part, des simulations détaillées des décharges plasma dans un écoulement transverse seront utilisées pour étudier les effets dimensionnels sur les propriétés de la décharge. Ensuite, le modèle phénoménologique développé précédemment [4] sera modifié pour tenir compte des observations faites à partir des simulations et des expériences.

Dans un second temps, des simulations aux grandes échelles (LES) de l'allumage de l'hydrogène assisté par plasma dans un canal en écoulement seront réalisées en utilisant le code AVBP et la fermeture plasma LES développée dans la première partie de la thèse. Les paramètres d'écoulement (vitesse, turbulence, mélange, etc.) et les paramètres de décharge (fréquence, énergie, etc.) seront étudiés afin de fournir des recommandations pour l'utilisation des décharges NRP (Nanosecond Repetively Pulsed) pour l'allumage de l'hydrogène assisté par plasma, tant en termes de fiabilité que de sécurité.

Finalement, la stabilisation de la flamme sera étudiée dans un brûleur réaliste tel que représenté dans la figure ci-dessous [5]. À partir d'une flamme stable, une force acoustique sera appliquée pour étudier la réponse de la flamme aux perturbations. Ainsi, la capacité des décharges NRP à atténuer les instabilités thermo-acoustique sera évaluée. De plus, ces simulations permettront une évaluation de l'impact des décharges NRP sur la production de NO_x qui est un point clé lors de l'utilisation de telles décharges dans un mélange réactif.



ORGANISATION DES TRAVAUX DE RECHERCHE (36 mois)

Tâche T1 : Etat de l'art : Simulation de la combustion assistée par plasma de l'hydrogène

Cette tâche vise à réaliser une revue de littérature exhaustive sur la simulation de la combustion assistée par plasma de l'hydrogène. Le but est de rassembler des articles de recherche pertinents, des communications de conférences et des publications scientifiques pour comprendre l'état de l'art actuel, les méthodologies, les découvertes et les domaines potentiels pour de futures recherches dans ce domaine.

Tâche T2 : Modélisation des effets du plasma

L'objectif est d'améliorer la connaissance des effets des décharges NEP de type NRP sur les mélanges réactifs contenant du H₂ en présence d'un écoulement. Pour ce faire, un travail important sera mené sur la validation et l'analyse d'une chimie permettant de décrire ces conditions, révélant la part relative de l'énergie allant au chauffage du gaz (rapide et lent) et à la production de radicaux. La validation sera effectuée par comparaison

avec les expériences de l'ETH Zurich. À partir d'une analyse cinétique, un modèle phénoménologique sera développé et implémenté dans le solveur Navier-Stokes AVBP dans le cadre de la simulation des grandes échelles (LES) comme dans [5]. De plus, des simulations détaillées en 3D des décharges plasma NRP seront réalisées et comparées avec des expériences. Les spécificités des décharges dans un écoulement rapide correspondant à un brûleur réel seront étudiées. Si elles s'avèrent importantes pour la physique de la combustion assistée par plasma, un modèle adéquat sera développé.

Tâche T3 : Allumage assisté par plasma de H2 dans un mélange en écoulement

Les mécanismes d'allumage assisté par plasma de l'hydrogène seront étudiés numériquement. Une fois validée par comparaison avec des expériences, la simulation numérique permettra une analyse précise de la physique en jeu. En effet, les simulations hautes fidélités donnent accès à l'état aérodynamique et thermochimique du mélange réactif en écoulement en tout point dans l'espace et le temps. Le modèle phénoménologique développé dans la tâche T2 sera utilisé pour prendre en compte les impacts du plasma, résultant en des effets thermiques, cinétiques et de transport. Comme déjà réalisé dans [6], certains effets de la décharge tels que la génération d'espèces radicalaires seront artificiellement inhibés pour évaluer l'impact de ces effets sur l'allumage. De plus, cette étude numérique analysera l'influence des niveaux de turbulence sur la probabilité d'allumage.

Tâche T4 : Atténuation des instabilités de combustion

La capacité des décharges NRP à stabiliser des flammes, en réduisant notamment les instabilités thermo-acoustiques, a été démontrée pour des hydrocarbures. L'objectif ici est d'évaluer cette capacité pour les mélanges H2-air et de comprendre les mécanismes physiques. Pour cela, un canal rectangulaire incluant des électrodes sera utilisé. La flamme sera accrochée dans la chambre de combustion située en aval de ce canal. Dans cette configuration, des perturbations acoustiques seront artificiellement induites pour imiter les haut-parleurs utilisés expérimentalement. La réponse de la flamme H2 avec et sans NRPD sera quantifiée.

Tâche T5 : Réduction des émissions de NOx

Une investigation approfondie de la formation de NOx sera réalisée tout au long de la chambre de combustion pour comprendre les principales voies chimiques de production et de destruction, basée sur les simulations de base effectuées dans la Tâche T4 (flamme non pulsée acoustiquement avec et sans NRPD). Un mécanisme de combustion H2-air incluant la chimie du NOx utilisant l'outil de réduction ARCANÉ sera dérivé. Ce mécanisme doit être capable de retrouver les effets des NRPD sur la production de NOx, en plus des voies conventionnelles du NOx traditionnelles dans les brûleurs H2-air. Ces simulations turbulentes détaillées en 3D aideront à comprendre le mécanisme complexe de formation du NOx dans les flammes de H2 assistées par plasma.

Tâche T6 : Rédaction

Capitalisation, valorisation et rédaction des rapports intermédiaires et du manuscrit de thèse : la dernière tâche portera sur une activité de fond menée tout au long de la thèse visant à capitaliser et synthétiser les différents travaux et avancées. Le doctorant devra fournir notamment des rapports intermédiaires annuels et fiches de synthèse, rédiger des publications et participer à des conférences d'audience internationale et assurer le transfert d'information et la formation auprès du Cerfacs. La rédaction du manuscrit de la thèse sera réalisée dans cette tâche.

PLANNING

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	
T1	■	■	■	■	■	■																															
T2	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■												
T3	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■												
T4																		■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	
T5																																					
T6						■							■																								

Soutenance

VALORISATION DES TRAVAUX DE RECHERCHE

Afin d'obtenir et de valoriser la thèse de doctorat, ainsi que d'acquérir de l'expérience dans la communauté scientifique, le ou la doctorant(e) doit publier ses travaux dans des revues scientifiques de renommée internationale. De plus, le ou la doctorant(e) doit également participer à des conférences internationales (telles que PROCI, GEC) et éventuellement à une ou deux conférences nationales ou européennes. L'objectif est de faire reconnaître la recherche doctorale et de contribuer à la visibilité des laboratoires d'accueil (CERFACS) au sein de la communauté scientifique internationale.

FORMATIONS

Plusieurs sessions de formation au Cerfacs ont été identifiées pour la première année de la thèse sur les outils numériques essentiels nécessaires au travail de thèse : AVBP, Cantera, Arcane, Antares, Centaur, et la simulation LES.

PROFIL SOUHAITE

- Diplôme de Master (ou équivalent) dans un domaine académique pertinent (génie mécanique, énergétique ou chimique, ou un domaine étroitement lié)
- Doit avoir un grand intérêt et être disposé à travailler dans le domaine de la combustion multi-physique, avec un accent sur les carburants zéro carbone, les technologies de turbines à gaz et les disciplines connexes, y compris la physique.

CE QUE NOUS PROPOSONS AU CERFACS

- Un large accès aux technologies, un environnement relationnel riche, des compétences internes reconnues au niveau national et international.
- Un environnement de travail inclusif et équitable.
- Une structure accessible aux personnes en situation de handicap.
- Une complémentaire santé qui offre une excellente couverture des soins de santé en complément de la sécurité sociale avec la possibilité d'y faire adhérer sa famille (conjoint.e et enfants).
- 6 semaines de congés annuels (avec la possibilité de bénéficier de 22 jours de congés supplémentaires par an liée à votre choix d'une semaine de travail de 39 heures au lieu de 35 heures).
- Des modalités de travail flexibles avec la possibilité de travailler à domicile jusqu'à deux jours par semaine.
- Un forfait mobilité durable qui permet à l'employeur de verser jusqu'à un maximum de 500 euros par an pour couvrir les frais de déplacement domicile-travail des personnels qui se rendent au travail en vélo.

COMMENT POSTULER ?

Pour postuler, veuillez envoyer votre CV et lettre de motivation à duchaine@cerfacs.fr ou barleon@cerfacs.fr, les candidatures sont ouvertes jusqu'au 31/08/2024.

À bientôt au CERFACS !

REFERENCES

- [1] L. Cheng, N. Barleon, B. Cuenot, O. Vermorel, A. Bourdon, Plasma assisted combustion of methane-air mixtures: Validation and reduction, *Combustion and Flame* 240 (2022) 111990.
- [2] L. Cheng, N. Barleon, O. Vermorel, B. Cuenot, A. Bourdon, AVIP: a low temperature plasma code (2022). [arXiv:2201.01291](https://arxiv.org/abs/2201.01291).
- [3] N. Barleon, L. Cheng, B. Cuenot, O. Vermorel, A. Bourdon, Investigation of the impact of NRP discharge frequency on the ignition of a lean methane-air mixture using fully coupled plasma-combustion numerical simulations, *Proceedings of the Combustion Institute* 39 (4) (2023) 5521–5530.
- [4] N. Barleon, L. Cheng, B. Cuenot, O. Vermorel, A phenomenological model for plasma-assisted combustion with NRP discharges in methane-air mixtures: PACMIND, *Combustion and Flame* 253 (2023) 112794.
- [5] Q. Male, S. Shcherbanev, N. Noiray, Numerical study of plasma assisted combustion in a sequential combustor, *Proceedings of the Combustion Institute* 39 (4) (2023) 5447–5456.
- [6] M. Castela, B. Fiorina, A. Coussement, O. Gicquel, N. Darabiha, C. O. Laux, Modelling the impact of non-equilibrium discharges on reactive mixtures for simulations of plasma-assisted ignition in turbulent flows, *Combust. Flame* 166 (2016).