

Analyse jointe simulation/expérience des transferts et réactions chimiques aux interfaces dans un réacteur catalytique de transformation du méthane et du dioxyde de carbone par plasma hors-équilibre

Le pacte vert européen, lancé en décembre 2019 a pour ambition de faire de l'Europe le premier continent neutre pour le climat dans le contexte actuel du changement climatique et de la dégradation de l'environnement. Le défi repose, en outre, sur l'utilisation efficace des ressources en passant à une économie propre. C'est pourquoi, l'accent est mis sur le développement de nouvelles technologies respectueuses de l'environnement pour permettre d'atteindre l'objectif fixé qui est de stopper les émissions nettes de gaz à effet de serre d'ici à 2050.

Dans ce contexte, la technologie plasma pour la valorisation simultanée du CH₄ et du CO₂, deux composés à effet de serre, présente les caractéristiques requises même si des avancées significatives sont nécessaires afin de permettre le passage de l'échelle laboratoire à l'échelle industrielle ou encore d'un concept à une innovation¹.

Ainsi, le projet proposé dans le cadre de cette thèse vise à améliorer la compréhension des interactions plasma/catalyse nécessaire aux développements de nouveaux procédés de stockage chimique de l'énergie par valorisation du méthane et du dioxyde de carbone. L'étude sera réalisée en associant des résultats expérimentaux obtenus sur un réacteur catalytique disponible à l'IC2MP² à des simulations numériques. En effet, la difficulté à mettre en œuvre des diagnostics expérimentaux sur ce genre de configuration limite les analyses physiques et donc les possibilités d'optimisation du procédé. La simulation numérique apparaît alors comme un outil indispensable pour approfondir l'analyse des transferts d'espèces et réactions chimiques aux interfaces gaz/catalyseur. Néanmoins, la complexité des interactions entre l'écoulement plasma, les réactions chimiques et le transfert d'espèces et d'électrons sur les surfaces solides nécessite de coupler différents outils numériques et différentes approches de modélisation. L'outil de simulation numérique qui doit être développé dans le cadre de ce projet consiste à coupler un solveur de Boltzmann (bibliothèque Bolos³) à un solveur de cinétique (bibliothèque Cantera⁴) pour décrire la cinétique des réactions chimiques à l'interface du catalyseur et du plasma hors-équilibre. Sur la base de cet outil simple (0D,1D), des tables de données thermochimiques seront construites par apprentissage automatique d'un réseau de neurones pour alimenter les modèles nécessaires aux simulations numériques 2D et 3D du réacteur (bibliothèque Open-Foam).

- (1) Bogaerts, A.; Centi, G. Plasma Technology for CO₂ Conversion: A Personal Perspective on Prospects and Gaps. *Front. Energy Res.* 2020, 8, 111.
- (2) Bouchoul, N.; Fourré, E.; Tatibouët, J.-M.; Duarte, A.; Tanchoux, N.; Batiot-Dupeyrat, C. Structural Modifications of Calcium Based Catalysts by Non-Thermal Plasma in the CO₂ Reforming of CH₄ and the Influence of Water. *J. CO₂ Util.* 2020, 35, 79–89. <https://doi.org/10.1016/j.jcou.2019.09.006>
- (3) Hagelaar G. J. M.; Pitchford L. C., Solving the Boltzmann equation to obtain electron transport coefficients and rate coefficients for fluid models, *Plasma Sources Sci. Technol.*, 2005, 14, 722–733.
- (4) Goodwin D. G.; Speth R. L.; Moffat H. K.; Weber B. W., Cantera: An Object-oriented Software Toolkit for Chemical Kinetics, Thermodynamics, and Transport Processes. 2009, <https://doi.org/10.5281/zenodo.1174508>

Contacts

Vincent ROBIN vincent.Robin@isae-ensma.fr

Catherine BATIOT-DUPEYRAT catherine.batiot.dupeyrat@univ-poitiers.fr