

## Sujet de thèse

### Modélisation numérique de la combustion de particules de fer

A ce jour, les sources d'énergies fossiles (charbon, pétrole et gaz) représentent plus de 80% de l'énergie produite dans le monde. Le caractère non durable de ces sources ainsi que leur impact sur le climat et la qualité de l'air sur terre plaident pour une transition urgente vers des sources d'énergies plus durables et faiblement émettrices de gaz à effet de serre.

L'énergie nucléaire, ou idéalement les énergies renouvelables, peuvent se substituer aux énergies fossiles à condition que des vecteurs énergétiques permettant une utilisation décalée dans le temps et dans l'espace - par le biais de stockage et de transport - soient disponibles. Actuellement, deux vecteurs attirent l'attention, il s'agit de l'hydrogène décarboné et les batteries. Il est clair que ces vecteurs représentent un intérêt certain, néanmoins, leur faible densité énergétique reste un frein majeur pour une utilisation généralisée.

Pour pallier cette limitation, les métaux représentent une option complémentaire et prometteuse en raison de leur grande densité énergétique, leur facilité de stockage et de distribution. Dans cette gamme de combustible, le fer (Fe) offre une option très intéressante car sa combustion génère des produits décarbonés et recyclables au moyen d'énergies décarbonées, avec des technologies existantes [1]. En effet, en raison du niveau de température atteint lors de la combustion des particules – inférieur aux températures d'ébullition du fer et des oxydes de fer – les réactions se déroulent à l'interface séparant le combustible du comburant de manière hétérogène, sans évaporation des espèces mises en jeu. Ce processus permet de produire des particules d'oxydes de fer en état solide, que l'on peut récupérer et réduire pour reproduire du fer.

Un certain nombre de travaux expérimentaux ont été dédiés à l'étude des mécanismes de combustion des particules de fer, ils se sont intéressés principalement à la combustion d'une particule isolée et à la propagation d'une flamme au sein d'un nuage de particules [2, 3, 4]. D'un autre côté, peu de travaux se sont intéressés à la modélisation et à la simulation de ces configurations [5].

Le projet de thèse que nous proposons a pour objectif d'améliorer la compréhension et la modélisation de la combustion des particules de fer en s'appuyant sur une approche multi-échelles, allant de la modélisation et l'analyse de la combustion d'une particule, à la modélisation et l'analyse de la combustion dans un nuage de particules (cf. Fig. 1).

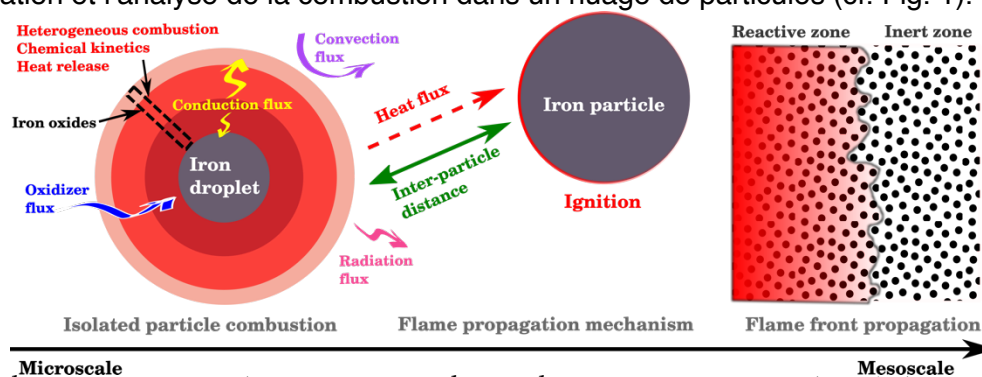


Fig. 1 : Schéma représentant les mécanismes physicochimiques mises en jeu lors de la combustion de particules de fer.

Le sujet de thèse est divisé en trois tâches principales :

**Tâche -1** : a comme objectif d'élaborer un modèle 0-D (et/ou 1-D) capable de restituer les propriétés principales qui caractérisent la combustion d'une particule sphérique de fer. Le modèle en question devrait tenir compte des phénomènes physicochimiques qui contrôlent le processus de combustion : (i) la diffusion de l'oxygène dans les oxydes de fer, (ii) les transferts thermiques (conduction, convection et rayonnement) et (iii) la cinétique d'oxydation. La validation du modèle développé s'appuiera sur des récents travaux expérimentaux [2].

**Tâche -2** : a pour but d'étudier les mécanismes de propagation des fronts réactifs dans un écoulement chargé de particules de fer. Dans ce contexte, l'effet des propriétés du gaz porteur (température, pression, composition et intensité de la turbulence) et celles de la phase dispersée (diamètre de particules, distance inter-particule et taux de ségrégation) sur l'allumage et la propagation des fronts réactifs sera analysé. Les simulations d'écoulements 2-D et/ou 3-D seront réalisées avec le code DNS Asphodèle<sup>1</sup> [6].

**Tâche -3** : est dédiée à l'identification des situations potentiellement dangereuses associées à l'utilisation du fer comme combustible. L'objectif étant d'évaluer les facteurs favorables à l'accélération des fronts réactifs et éventuellement à la transition de mode de combustion - de la déflagration à la détonation - au sein d'un nuage de particules de fer. Les simulations seront réalisées avec le code DNS Resident<sup>2</sup> [7].

**Profil recherché** : Master 2 ou Ingénieur avec des connaissances en mécanique des fluides, en combustion, en méthodes numériques et en programmation avec les langages PYTHON et FORTRAN.

**Encadrants** : Zakaria Bouali, Ashwin Chinnayya et Vincent Robin

**Contact** : zakaria.bouali@ensma.fr / **Début de la thèse** : à partir de septembre 2022

Ce sujet de thèse est financé par le programme du gouvernement Français "Investissements d'Avenir" (EUR INTREE, référence ANR-18-EURE-0010).

- [1] J. M. Bergthorson, S. Goroshin, M. J. Soo, P. Julien, J. Palecka, D. L. Frost and D. J. Jarvis (2015). Direct combustion of recyclable metal fuels for zero-carbon heat and power. *Applied Energy*, 160, 368-382.
- [2] D. Ning, Y. Shoshin, J. A. van Oijen, G. Finotello and L. P. H. de Goeij (2021). Burn time and combustion regime of laser-ignited single iron particle. *Combustion and Flame*, 230, 111424.
- [3] F. D. Tang, S. Goroshin, A. Higgins and J. Lee (2009). Flame propagation and quenching in iron dust clouds. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32(2), 1905-1912.
- [4] J. Palečka et al. (2019). A new kind of flame: Observation of the discrete flame propagation regime in iron particle suspensions in microgravity. *Combustion and Flame*, 209, 180-186.
- [5] X. Mi, A. Fujinawa and J. M. Bergthorson (2022). A quantitative analysis of the ignition characteristics of fine iron particles. *Combustion and Flame*, 240, 112011.
- [6] Z. Bouali, J. Reveillon and C. Pera (2021). Development of an extended reactor configuration to analyze preferential segregation impact on spray autoignition. *Fuel*, 302, 120869.
- [7] S. Taileb, J. Melguizo-Gavilanes and A. Chinnayya (2020). Influence of the chemical modeling on the quenching limits of gaseous detonation waves confined by an inert layer. *Combustion and Flame*, 247-259.

<sup>1</sup> HPC, low-mach, dilatable, multispecies, DNS, in house code

<sup>2</sup> HPC, compressible, multispecies, DNS, in house code