

## Proposition de thèse

### **Modélisation multi-échelle de la combustion de particules de fer**

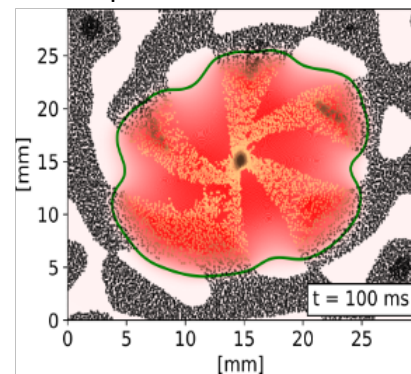
**Contact : Zakaria Bouali** – zakaria.bouali@ensma.fr

La transition énergétique — qu’il s’agisse de décarboner les secteurs industriels, de diversifier les sources d’énergie ou d’améliorer la résilience des systèmes — impose de repenser en profondeur les stratégies de production, de stockage et d’utilisation de l’énergie. Les systèmes actuels, utilisant des combustibles fossiles, montrent aujourd’hui leurs limites en raison des émissions de gaz à effet de serre et d’une dépendance forte aux ressources non renouvelables.

Dans ce contexte, les combustibles métalliques, tels que le fer, l’aluminium ou le magnésium, émergent comme des vecteurs énergétiques innovants : stables, recyclables, denses en énergie et compatibles avec un cycle fermé oxydation/réduction dans lequel le métal oxydé peut être régénéré. Ce concept ouvre des perspectives majeures pour le stockage massif des surplus d’électricité renouvelable ainsi que pour la production contrôlée de chaleur, d’énergie mécanique ou électrique.

Parmi ces métaux, le fer occupe une place privilégiée en raison de son fort potentiel de recyclabilité, particulièrement attractif pour le développement de cycles énergétiques fermés à grande échelle. Son utilisation comme vecteur énergétique renouvelable constitue une voie prometteuse pour des applications industrielles déployables dans des environnements contraints.

Une première thèse de doctorat conduite au sein de l’équipe SFCT (financée par l’EUR INTREE) [1, 2] a permis : (i) de développer un **modèle de combustion d’une particule de fer isolée**, fondé sur l’optimisation de la dynamique d’oxydation observée expérimentalement — ce modèle a démontré sa capacité à reproduire les principales caractéristiques de la combustion de particules individuelles, y compris dans des environnements à haute température ou enrichis en oxygène, conditions pertinentes pour les systèmes énergétiques émergents ; et (ii) **d’implémenter le modèle développé dans un code DNS** avec une approche lagrangienne (DNS-DPS) — ce qui a permis d’effectuer une première **évaluation de l’impact de la ségrégation préférentielle sur la propagation des fronts réactifs** dans des configurations laminaires (Fig. 1) —.



**Fig. 1 :** Propagation d’un front réactif dans un nuage de particules de fer [1]

Ce nouveau sujet de thèse vise à poursuivre et à étendre ces développements en améliorant la modélisation multi-échelle et multi-physique de la combustion du fer, depuis la particule isolée jusqu'au nuage de particules réactives. L'objectif global est de renforcer la représentation des mécanismes physico-chimiques mis en jeu dans les conditions susceptibles d'être rencontrées dans de nouveaux systèmes énergétiques ou dans des systèmes rétrofités, tout en intégrant des phénomènes physiques supplémentaires que nous n'avons pas encore pris en compte.

Le programme scientifique de cette thèse s'articule autour de trois axes complémentaires visant à améliorer la compréhension et la modélisation de la combustion de la poudre de fer à différentes échelles. Le premier axe consiste à développer un **modèle cinétique d'oxydation des particules**, afin d'affiner la modélisation de la phase d'allumage des particules.

Le second axe porte sur l'**implémentation d'un modèle de rayonnement adapté aux milieux diphasiques**, dans lesquels des particules de fer sont en suspension dans un gaz hétérogène en température et en composition. Ce développement est essentiel pour rendre compte de l'impact du rayonnement sur la combustion à l'échelle de la particule et du nuage de particules.

Enfin, le troisième axe vise à étudier, par simulation numérique directe (DNS), les **processus d'allumage et de propagation de fronts réactifs dans des écoulements turbulents** représentatifs des applications ciblées. Le doctorant analysera l'influence des propriétés de l'écoulement et des particules sur : la stabilité des fronts, la vitesse de propagation et l'efficacité globale du processus de combustion.

## Références

- [1] M. Kuhmann. Modélisation numérique de la combustion de particules de fer. Thèse de doctorat, soutenance le 12/12/2025.
- [2] M. Kuhmann, V. Robin, A. Chinnayya and Z. Bouali. Optimised OD model for the simulation of single iron particle combustion. Fuel, 381, 133436, 2025.