



Sujet de thèse

Réduction par chimie virtuelle de cinétiques chimiques appliquées à la propulsion solide

La maîtrise de la thermochimie est une partie intégrante du cœur de métier d'ArianeGroup. Elle est nécessaire tant à la compréhension du comportement du propulseur au court du tir qu'à la maîtrise des procédés de fabrication des lanceurs.

Des études récentes menées dans le cadre du développement du moteur à propergol P120 Ariane 6 ont souligné l'importance d'une représentation précise de l'évolution du mélange gazeux dans la compréhension de la dynamique interne du propulseur dans les différentes phases du tir, avec en particulier l'allumage. Parallèlement, il a été observé qu'une bonne modélisation des ambiances radiatives générés par les gaz de combustion nécessite une prise en compte des phénomènes de post-combustion des gaz de propergol ; ces données sont essentielles à la définition fine des protections thermiques externe du lanceur comme au dimensionnement des installations industrielles pyrotechniques associées à sa fabrication.

Par ailleurs, la montée en cadence de la production des tuyères Ariane 6 impose une optimisation des moyens de production des matériaux composites en voie CVI (chemical vapor infiltration). Si des cinétiques complexes sont aujourd'hui disponibles afin de modéliser ces phénomènes, un modèle bas ordre reste nécessaire à l'optimisation rapide et efficace des chargements de four de densification.

L'objectif de cette thèse est alors d'appliquer une méthode novatrice, dite de "chimie virtuelle", à ces deux problématiques. La chimie virtuelle a été proposée et développée au laboratoire EM2C dans le cadre de la thèse de Mélodie Cailler [1,2] dirigée par Benoît Fiorina. Cette technique repose moins sur l'analyse du schéma réactionnel complet que sur l'optimisation des propriétés physico-chimiques d'espèces et de réactions équivalentes à partir d'une base de cas tests prédéfinis. Elle propose ainsi de bâtir un système chimique réduit semblable, dans sa forme, à un schéma réactionnel traditionnel, et donc aisément intégrable dans une chaîne de calcul industriel. Cette méthode bénéficie par ailleurs des atouts traditionnels des méta-modèles –faible coût d'évaluation, bonne précision dans la zone d'optimisation- tout en permettant une convergence exacte, dans le cas d'un grand nombre d'espèces et de réactions, vers le schéma réactionnel initial.

L'efficacité de la méthode a été démontrée pour la prédiction du monoxyde de carbone issu de la combustion d'un hydrocarbure lourd : le kérosène. Pour une précision similaire, le coût de calcul d'une flamme 3D turbulente est environ 10 fois plus faible que celui engendré par une chimie analytique réduite [3]. Les travaux de thèse de Giampaolo Maio, également

doctorant au laboratoire EM2C, ont étendu la méthode de chimie virtuelle aux pertes thermiques [4] et à la prédiction des oxydes d'azote. Des travaux sont également en cours sur la prédiction des suies et sur la prédiction des polluants issus de la combustion diphasique. Les enjeux scientifiques qui seront relevés dans la thèse sont d'une part de proposer un schéma cinétique virtuel capable de prédire la composition complexe des gaz lors de la post-combustion du propergol, et d'autre de définir une stratégie de modélisation fine et à coût CPU réduit de la synthèse par voie CVI des matériaux composites.

Cette thèse se déroulera au Laboratoire Énergétique Moléculaire et Macroscopique, Combustion (EM2C) à Gif-sur-Yvette, sous la direction de Benoît Fiorina. L'expérience acquise par son équipe dans ce domaine, par le biais en particulier de la thèse de Mélody Cailler, permet d'envisager une collaboration industrielle approfondie et ambitieuse sur les thématiques liées à la propulsion solide en aérospatial.

Ce projet comporte deux phases :

- Dans un premier temps, la chimie virtuelle sera appliquée à des compositions de propergol aluminisés (Butalane®) en s'attachant à s'adapter aux applications d'allumage, de calculs de performances et de post-combustion des gaz de propergol au contact des gaz de pyrolyse ou de l'air. Cette première étape permettra une amélioration des descriptions en gaz équivalent inertes couramment employées à ArianeGroup.
- Dans un second temps, une description approchée des cinétiques chimiques intervenant durant les cycles de densification des composites en voie CVI sera engagée. Ce volet, plus ambitieux, a pour objectif de permettre d'affiner les simulations numériques de dépôts de pyrocarbone. Cette problématique s'inscrit au cœur des enjeux d'optimisation des cycles de production des tuyères P120.

Le candidat devra justifier d'un niveau de master ou équivalent dans le domaine de la mécanique des fluides, de l'énergétique, de la chimie et/ou des mathématiques appliquées.

La nationalité française sera requise.

Références

[1] M. Cailler, Virtual chemical mechanisms optimized to capture pollutant formation in turbulent flames, PhD thesis, CentraleSupélec, Paris Saclay University (2018)

[2] M. Cailler, N. Darabiha, D. Veynante and B. Fiorina. Building-up virtual optimized mechanism for flame modeling. Proc. Combust. Inst. Vol 36 (1), pp 1251-1258 (2017)

[3] M. Cailler, N. Darabiha, D. Veynante and B. Fiorina. Virtual chemistry for CO prediction. Submitted (2018)

[4] G. Maio, M. Cailler, R. Mercier and B. Fiorina. Virtual chemistry for temperature and CO prediction in LES of non-adiabatic turbulent flames. Proc. Combust. Inst. Vol 37 (2019)

Candidature :

Ingénieur ou master avec des compétences en combustion et/ou en cinétique chimique. Pour postuler merci d'envoyer lettre de motivation, CV et références à :

Benoît Fiorina

Professeur des Universités à CentraleSupélec

Laboratoire EM2C, CNRS.

benoit.fiorina@centralesupelec.fr.