

## Développement d'outils numériques couplant cinétique chimique et plasma hors-équilibre pour l'analyse conjointe modélisation/expérience

Les technologies plasma sont déjà matures pour de nombreuses applications industrielles mais présentent toujours un potentiel très important dans les domaines de la transition énergétique<sup>1</sup> comme celui de la propulsion aéronautique<sup>2</sup> et spatiale. Les technologies associées sont très variées, par exemple, un réacteur catalytique pour le stockage de CO<sub>2</sub> ou des systèmes d'allumage adaptés au contrôle des processus de combustion. Quelle que soit l'application, des recherches sont nécessaires pour comprendre les interactions entre le plasma et l'écoulement. Ces études vont nécessiter des outils numériques de simulation pour compléter les données expérimentales. Un des principaux verrous au développement de ces outils est la modélisation de la cinétique chimique en présence d'un très grand nombre d'espèces chargées et de réactions induites par le plasma. La voie envisagée dans le cadre de ce projet pour aborder ces problèmes physiques multidimensionnels est l'analyse conjointe de la modélisation et des expériences. Les données issues d'expérience permettront de corriger ou d'optimiser des paramètres de modèles fluides basés sur une représentation simplifiée de la cinétique chimique. Une première étape consiste à développer des outils numériques simples (0D/1D) couplant un solveur de Boltzmann (bibliothèque BOLOS<sup>3</sup>) à un solveur de cinétique chimique (bibliothèque CANTERA<sup>4</sup>) pour décrire de manière la plus détaillée possible la cinétique des réactions chimiques en présence d'un plasma hors-équilibre. Ces outils serviront ensuite à développer des modèles du couplage plasma/cinétique pouvant être implémentés par la suite dans des modèles fluides classiques. Les résultats compléteront des données expérimentales pour analyser l'impact du plasma sur l'écoulement.

Les recherches réalisées dans les laboratoires Poitevin Pprime et IC2MP concernent des disciplines très variées couvrant un large spectre de thématiques et de compétences complémentaires allant de la physique des matériaux à la mécanique des fluides, de la chimie à l'énergétique. Ce projet se situe à l'interface entre les recherches sur les plasmas qui sont aujourd'hui essentiellement expérimentales sur le site de Poitiers et les activités en simulations numériques des écoulements réactifs. L'objectif est donc de développer des outils numériques sur la base des compétences des équipes de combustion pour compléter les outils d'analyse dédiés aux études expérimentales sur les plasmas froids. Le candidat devra donc avoir de solides connaissances sur les plasmas froids et un intérêt prononcé pour la programmation et les développements numériques.

### Références

- <sup>1</sup> Bogaerts, A., Centi, G., Plasma Technology for CO<sub>2</sub> Conversion: A Personal Perspective on Prospects and Gaps, *Front. Energy Res.* 2020, 8, 111. <https://doi.org/10.3389/fenrg.2020.00111>
- <sup>2</sup> M. Castela et al., 3-D DNS and experimental study of the effect of the recirculating flow pattern inside a reactive kernel produced by nanosecond plasma discharges in a methane-air mixture, *Proceedings of the Combustion Institute*, 2017, 36(3), 4095—4103. <https://doi.org/10.1016/j.proci.2016.06.174>
- <sup>3</sup> 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. <https://doi.org/10.1088/0963-0252/14/4/011>
- <sup>4</sup> D. G. Goodwin et al., Cantera: An Object-oriented Software Toolkit for Chemical Kinetics, Thermodynamics, and Transport Processes. 2009, <https://doi:10.5281/zenodo.1174508>

Date de prise de fonction : avant septembre 2022

Durée du contrat : 24 mois

### Contacts

Vincent ROBIN [vincent.robin@ensma.fr](mailto:vincent.robin@ensma.fr)

Ashwin Chinnayya [ashwin.chinnayya@ensma.fr](mailto:ashwin.chinnayya@ensma.fr)