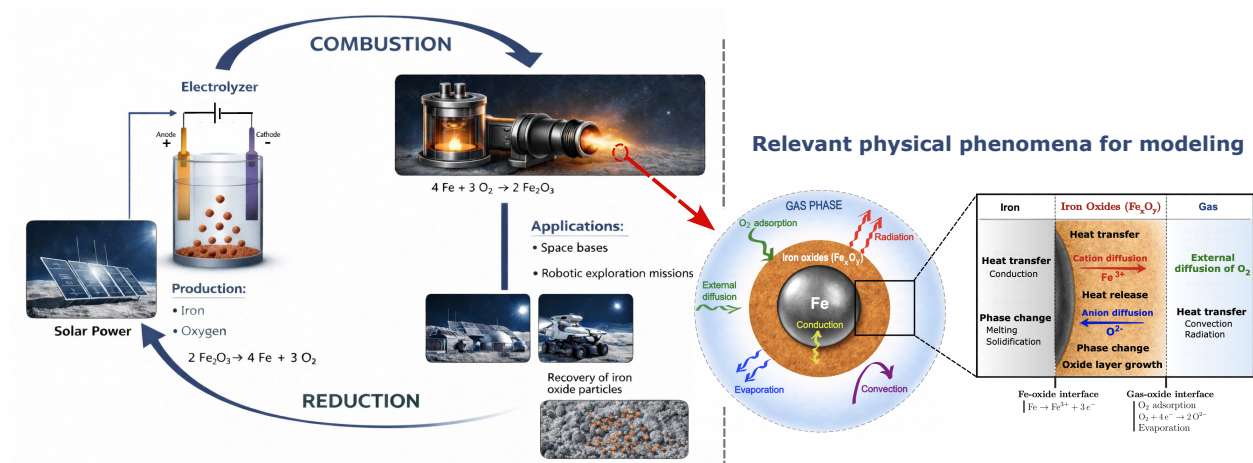


Sujet de Thèse

Modélisation de la combustion du fer par la méthode de champ de phase

Contacts : Zakaria Bouali – zakaria.bouali@ensma.fr
Azdine Nait-Ali – azdine.nait-ali@ensma.fr



Contexte scientifique et motivation

L'exploration spatiale de longue durée — qu'il s'agisse de missions habitées ou robotiques — impose de repenser les stratégies énergétiques afin de garantir une autonomie vis-à-vis des ressources terrestres. Les systèmes énergétiques actuels, basés sur des combustibles chimiques classiques ou sur le nucléaire, présentent des limites en termes de sécurité, de recyclabilité et de disponibilité durable des réactifs.

Dans ce contexte, les métaux combustibles, tels que le fer, l'aluminium ou le magnésium, apparaissent comme des vecteurs énergétiques prometteurs : stables, denses en énergie, recyclables et compatibles avec un cycle fermé d'oxydation/réduction [1, 2]. Ce concept de cycle fermé se prête particulièrement bien aux applications de production de chaleur, d'énergie mécanique ou électrique, où les produits de combustion peuvent être collectés et réduits pour produire à nouveau le métal et l'oxygène. Parmi ces métaux, abondants dans les régolites lunaires et martiens, le fer présente le plus fort potentiel de recyclabilité, ce qui en fait un candidat particulièrement attractif pour une utilisation in situ, dans le contexte spatial, où la production et le stockage de l'énergie, ainsi que la réutilisation des produits de combustion doivent être optimisés.

L'objectif général de cette thèse est d'étudier les mécanismes de combustion du fer dans des conditions représentatives de celles rencontrées dans les environnements spatiaux, en s'appuyant sur

une modélisation multi-échelle de la combustion, depuis la particule isolée jusqu'au nuage de particules réactives.

Une première thèse de doctorat [3, 4] au sein de l'équipe CT, financée par l'EUR INTREE, a permis le développement d'un modèle zéro-dimensionnel (0D) de combustion d'une particule isolée basé sur l'optimisation de la dynamique de l'oxydation observée expérimentalement via le taux d'absorption de l'oxygène par la particule. L'effort d'optimisation s'est révélé particulièrement nécessaire dans les conditions riches en oxygène — des conditions particulièrement intéressantes pour les applications spatiales, où l'oxygène peut être produit par la réduction des oxydes de fer. Le modèle développé a montré sa capacité à restituer les principales propriétés associées à la combustion d'une particule isolée, mais au prix d'hypothèses simplificatrices fortes.

L'objectif de cette nouvelle proposition de thèse est donc d'améliorer la compréhension des phénomènes physiques impliqués dans l'oxydation du fer, en développant une modélisation spatialement résolue d'une particule, ainsi que d'un ensemble de particules, afin (i) d'analyser les transferts de chaleur et le transport des ions au sein même de la particule, et (ii) d'améliorer la description des interactions inter-particulaires, notamment en ce qui concerne la propagation d'un front réactif d'une particule à sa voisine. Une attention particulière sera également portée à l'amélioration de la modélisation et de la description des changements de phase (solide-liquide et liquide-solide) qui interviennent à haute température lors de la combustion.

Approche de modélisation

Pour cela, nous envisageons d'utiliser la méthode de champ de phase, qui a largement démontré sa capacité à modéliser le développement d'une couche d'oxyde [5] ou d'un front de solidification [6]. Cette méthode permettra de simuler la croissance de la couche d'oxyde gouvernée par le transport des anions d'oxygène et des cations de fer. L'accroissement de cette couche dépendra naturellement des propriétés de la particule et de l'environnement gazeux, en particulier de la concentration en oxygène.

Après une revue bibliographique approfondie, le doctorant élaborera un modèle de champ de phase couplé à la diffusion des ions et de la chaleur. Dans cette approche, l'interface métal/oxyde sera représentée par une zone spatialement diffuse d'épaisseur finie et constante. Ce cadre théorique permet de décrire le système à l'échelle mésoscopique, à l'aide de grandeurs thermodynamiques macroscopiques telles que la température et la concentration.

Le développement d'une telle modélisation dans le domaine de la combustion des métaux, et dans des conditions extrêmes telles que celles rencontrées lors de la combustion du fer, constitue une approche totalement inédite. Elle ouvrira de nouvelles perspectives pour la compréhension des processus d'oxydation à la fois surfacique et au sein même de la particule ce qui contribuera à l'amélioration des modèles 0D, particulièrement adaptés à l'étude de la propagation des fronts réactifs dans des écoulements chargés de particules [3] (Fig.1).

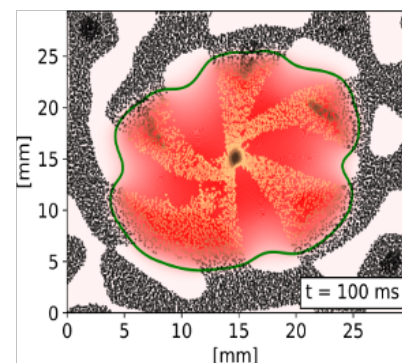


Fig. 1 : Propagation d'un front réactif dans un nuage de particules de fer [4]

Les outils développés permettront également d'étudier la propagation au sein d'un nuage constitué avec un nombre limité de particules résolues, un point essentiel pour caractériser et analyser la combustion d'un groupe de particules.

Encadrement et conditions matérielles :

Cette activité de recherche bénéficiera d'une forte synergie entre deux équipes de l'Institut Pprime : l'équipe Combustion turbulente (CT) et l'équipe Endommagement et durabilité (ENDO). L'équipe CT apportera son expertise reconnue dans la modélisation de la combustion diphasique, en particulier dans l'étude de la combustion des particules de fer. De son côté, l'équipe ENDO contribuera grâce à son expérience approfondie dans le développement et l'application de modèles de champ de phase à divers phénomènes de transformation de la matière. La complémentarité de ces compétences offrira un environnement scientifique particulièrement favorable à la réussite du projet et à l'émergence de nouvelles approches de modélisation de la combustion des métaux.

Profil :

Une candidate ou un candidat titulaire d'un diplôme de Master ou d'Ingénieur, possédant de solides connaissances en mathématiques appliquées, en transport dans les milieux condensés, en mécanique des fluides et/ou en combustion, ainsi qu'en méthodes numériques. Une expérience dans le développement et l'utilisation de méthodes de suivi d'interface serait particulièrement appréciée.

Critère d'éligibilité :

Cette offre s'inscrit dans le cadre d'un financement réservé aux personnes de nationalité française ou ressortissantes d'un État membre de l'Union européenne.

Références :

- [1] European Space Agency, Metal fuel for carbon-free energy on Earth... and the Moon, web communication, 2023. [Available here](#)
- [2] J. M. Bergthorson. Recyclable metal fuels for clean and compact zero-carbon power. Progress in Energy and Combustion Science, 68, 169-196, 2018.
- [3] M. Kuhmann. Modélisation numérique de la combustion de particules de fer. Thèse de doctorat, soutenance prévue le 12/12/2025.
- [4] M. Kuhmann, V. Robin, A. Chinnayya and Z. Bouali. Optimised OD model for the simulation of single iron particle combustion. Fuel, 381, 133436, 2025.
- [5] K. Kim, Q. C. Sherman, L. K. Aagesen and P. W. Voorhees. Phase-field model of oxidation: Kinetics. Physical Review E, 101(2), 022802, 2020.
- [6] K. Ji, M. Zhong and A. Karma. Phase-field model of alloy solidification far from chemical equilibrium at the solid-liquid interface. Physical Review Research, 7(3), 033128, 2025.