

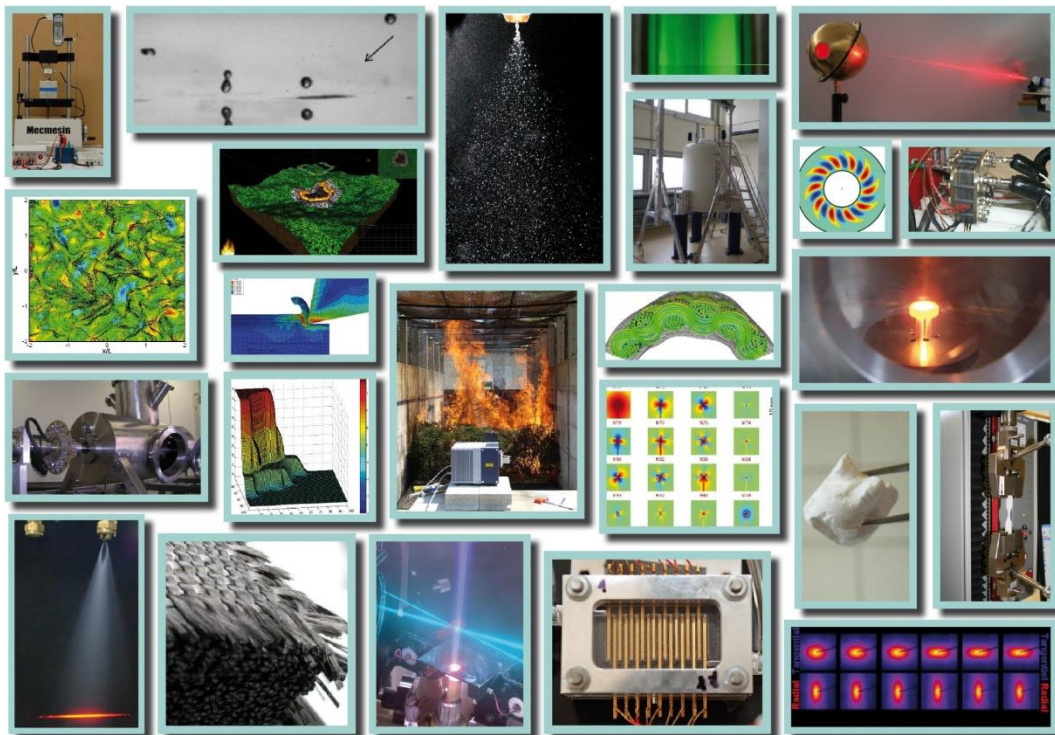
Brief description of internship offers such as Research level M2 at LEMTA or in partnership with LEMTA

The topics presented below are classified by LEMTA research groups:

- Fluid Media, Rheophysics;
- Energy and Transfer;
- Energy Carriers ;
- MRI for Engineering.

The topics are briefly described and accompanied by the contact information. This will allow you to find out more if you are interested, and to apply directly.

Note: for some subjects there is only the French version available.



Academic year 2022/2023

Research group Fluid Media, Rheophysics

Title: Spatio-temporal stability analysis of Taylor-Couette flow with an axial flow for a non-Newtonian fluid.

Supervisors: Chérif Nouar , cherif.nouar@univ-lorraine.fr

Cécile Lemaitre , cecile.lemaitre@univ-lorraine.fr

Main fields: Fluid Mechanics

Description

1. Context

The filtration of suspensions is limited by the problem of clogging: accumulation of particles on the filtering wall (Fig. 1). To alleviate this problem, dynamic filtration takes advantage of secondary flows, often obtained by hydrodynamic instabilities, to produce a resuspension of the accumulated particles. The control of this process requires a detailed study of the coupling between hydrodynamic instabilities, particles transport and rheology in suspensions. In the particular case of rotative filtration (Fig. 2) the flow is a combination of Taylor-Couette flow with axial and radial flows. This configuration is ideal to study and control the different parameters involved in filtration.

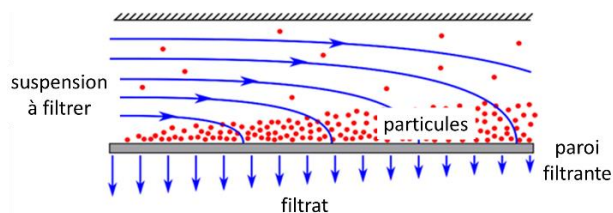


Fig.1 : Particle accumulation on the filtering wall during filtration

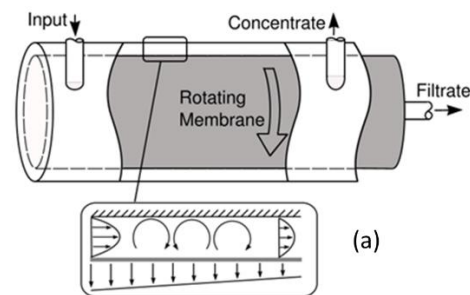


Fig.2 Rotative filtration process

2. Proposed work

Because of the large number of parameters which intervene in this problem and to understand the influence of these parameters, it is necessary to consider simpler configurations and to progressively complexify the problem until approaching the real situation. During this internship, we will consider the Taylor-Couette configuration with an axial flow for a purely viscous non-Newtonian fluid. We will perform a spatio-temporal stability analysis of this flow and compare the results with those obtained experimentally.

3. References

1. Agbessi, Alibenyahia, Nouar, Lemaitre, Choplin (2015). Linear stability of Taylor–Couette flow of shear-thinning fluids: modal and non-modal approaches. [*J. Fluid Mech.*, **776**](#)
2. Lemaitre, Nouar, Agbessi, Marchal, Choplin (2018) Instability of the Taylor-Couette-Poiseuille flow with radial flux of a shear-thinning fluid, 20th ICTW, 11-13/07/2018, Marseilles.
3. Alibenyahia, Lemaitre, Nouar, Ait-Messaoudene (2012). *Revisiting the stability of circular Couette flow of shear-thinning fluids.* [*J. Non-Newt. Fluid Mech.*, **183**](#).
4. Martinand, Serre, Lueptow (2009). Absolute and convective instability of cylindrical Couette flows with axial and radial flows. *Physics of fluids*, **21**, 104102.

Title: Mechanical behavior of vitrimers and vitrimer based composites

Supervisors: **ANDRE Stephan** , stephane.andre@univ-lorraine.fr
FARGE Laurent , laurent.farge@univ-lorraine.fr

Main fields: Mechanics of polymers and composites

It is essentially an experimental work, but a complementary modelling work is also possible.

Description

1. Context

Since 2019, our research team in LEMTA has studied vitrimers, a new polymer class with unique rheological properties. Vitrimers could help to overcome the main limitation of thermosets and thermoplastics. We have recently managed to use these materials as matrix for composite with glass beads or short fibers reinforcements. The synthesis process is composed of two phases. The composite with vitrimer matrix is first produced by continuous reactive extrusion. Parts are next obtained by injection/molding. We have shown that that vitrimerization leads to significant improvement of the composite mechanical properties (figure1).

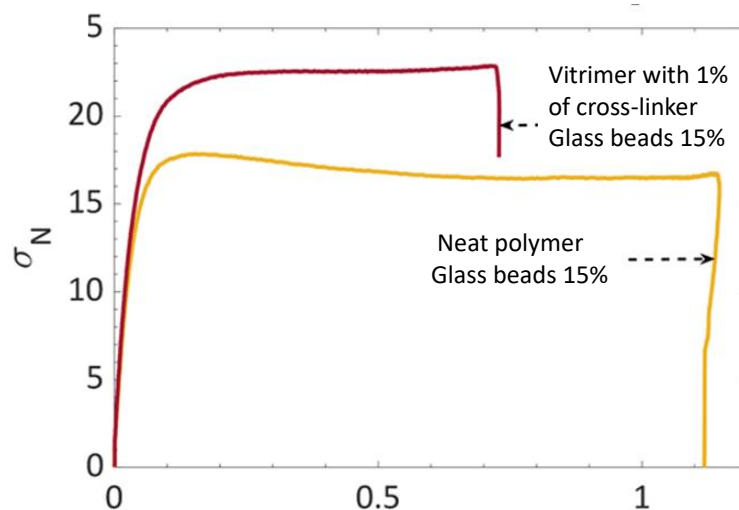


Figure 1 a) Tensile properties comparison of composites with matrices corresponding to the neat polymer (yellow curve) and to the same polymer vitrimerized (red curve). The glass bead volume fraction is the same in the two cases: 15%.

2. Proposed work

The main objective is to analyze the mechanical properties of composites with vitrimer matrices. The influence of the following parameters will be studied in details:

- Quantity of cross-linker added in the reactive mixture,
- Nature and volume fraction of reinforcements,
- Surface treatment applied to the reinforcement surfaces to improve the reinforcement/matrix bond.

We may also study the mechanical behavior of specimens obtained by 3D printing, a technique which makes it possible to avoid the polymer orientation effect that occurs during injection/molding.

More specifically, the intern will carry out tensile tests associated with 3D Digital Image Correlation measurements at various temperatures. He will also perform DMA (Dynamic Mechanical Analysis) measurements. Depending on the candidate's profile and wishes, a complementary modelling work is also possible.

Intitulé : Caractérisation de la dynamique d'un courant de gravité à flux continu

Encadrant(s) : Boris Arcen , boris.arcen@univ-lorraine.fr

Yvan Dossmann , yvan.dossmann@univ-lorraine.fr

Rabah Mehaddi , rabah.mehaddi@univ-lorraine.fr

Domaine : Mécanique des fluides, simulation numérique

Descriptif

1. Contexte

Les courants de gravité sont présents dans de nombreux écoulements naturels (convergence des masses d'eaux océaniques ou fluvio-océaniques, courants de turbidité, avalanches, vents catabatiques) et industriels (évacuation des eaux usées, procédés alimentaires et pharmaceutiques, incendies dans les tunnels). La compréhension de la dynamique de ces courants est au coeur d'enjeux sanitaires et environnementaux cruciaux.

L'objectif de ce stage est de caractériser la dynamique de courants de gravité lorsque ceux-ci sont alimentés de manière continue par une source de densité/flottabilité (Sher et Woods, 2017).

2. Travail proposé

Pour cette étude, nous avons créé une configuration numérique 3D à haute résolution d'un courant de gravité à flux continu à l'aide du code NEK5000 (Argonne National Laboratory, Illinois, <https://nek5000.mcs.anl.gov>). Ce code de calcul haute performance réalise des simulations très précises (DNS) d'écoulements complexes à partir de la méthode des éléments spectraux. Pour une configuration proche de celle étudiée expérimentalement par Sher et Woods (2017), il nous a permis d'extraire de nombreux champs hydrodynamiques précis et complets (vitesse, pression, et densité). Ces simulations ont été effectuées pour un nombre de Reynolds fixe et des différences de densité comprises entre 5 et $110 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ (soit des nombres de Froude compris entre 0,6 et 2,7). Afin d'illustrer les résultats obtenus avec NEK5000, la figure 1 présente les structures tourbillonnaires présentes au sein d'un champ hydrodynamique.

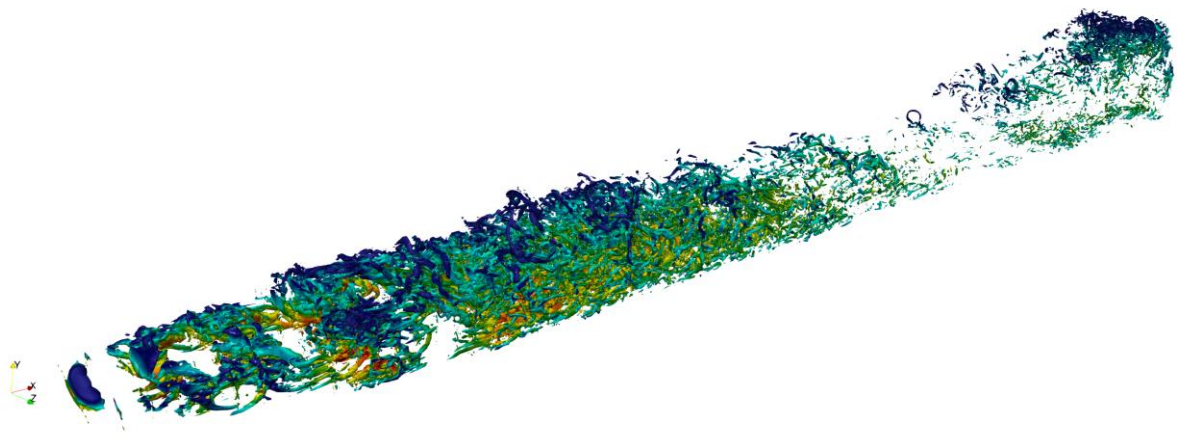


Figure 1. Structures tourbillonnaires au sein d'un courant de gravité caractérisé par une injection continue et un nombre de Froude égal à 2.7. L'extraction des structures est effectuée

à partir de données que nous avons obtenues avec le code NEK5000 et du critère λ_2 (Jeong et Hussain, 1995).

Pendant ce stage, l'objectif sera de caractériser la dynamique de courants de gravité à partir des champs hydrodynamiques extraits de Nek5000. La caractérisation sera réalisée à partir de champs 3D, mais aussi à partir de champs 2D (produits à partir d'une moyenne spatiale des champs 3D). La vitesse de propagation du front, la variation temporelle du volume du courant, ainsi que des bilans (énergie potentielle disponible et entraînement) caractérisant le mélange entre le courant et le fluide environnant constitueront une partie des grandeurs étudiées en fonction du nombre de Froude.

Ce travail de recherche pourra se poursuivre au sein du LEMTA dans le cadre d'un doctorat.

3. Références

- Jeong, J., & Hussain, F. (1995). On the identification of a vortex. *Journal of Fluid Mechanics*, 285, 69-94.
- Sher, D., & Woods, A. (2017). Mixing in continuous gravity currents. *Journal of Fluid Mechanics*, 818, R4.

Intitulé : Développement d'une technique de mesure basée sur la fluorescence induite par laser pour étudier la capture du CO₂

Encadrant(s) : Guillaume Castanet, guillaume.castanet@univ-lorraine.fr
Hadrien Chaynes, hadrien.chaynes@univ-lorraine.fr
Ophélie Caballina, ophelie.caballina@univ-lorraine.fr

Domaine : Mécanique des fluides, phénomènes de transfert, métrologie optique

1. Contexte

L'Union européenne a pour objectif de devenir neutre en CO₂ d'ici 2050. Cependant, des combustibles à base de carbone continueront à être utilisés au moins pour un certain temps dans le mixte énergétique en raison de leur fiabilité, et de leur importance en tant que source d'énergie d'appoint. Pour parvenir à une économie neutre en carbone, les gaz issus de la combustion doivent donc être décarbonés. Un moyen d'y parvenir est la capture du CO₂ par des procédés d'absorption. Ces procédés sont encore assez mal compris bien qu'ils soient largement répandus dans l'industrie chimique sous des formes variées, par exemple des réacteurs tubulaires à film tombant, ou des colonnes d'aspersion par spray. La complexité des phénomènes de transfert de matière au niveau des interfaces liquide/gaz fait qu'il est difficile de prédire le taux de transfert par absorption dans les systèmes par absorption. La conception de ces systèmes se fait donc le plus souvent de façon empirique. Il y a donc besoin d'expériences de base afin de développer des modèles plus appropriés de capture du CO₂ dans différentes configurations diphasiques : sprays de gouttelettes, films liquides tombants, colonnes à bulles...

2. Travail proposé

L'objectif du stage est de développer une technique de mesure pour caractériser l'absorption du CO₂ dans des écoulements diphasiques, où l'utilisation de techniques de mesure optiques est indispensable en raison de son caractère non-intrusif. L'absorption de CO₂ déplace le pH vers une solution acide. Ce phénomène peut être mis en évidence à l'aide de la fluorescence induite par laser de certains colorants [1,2]. Dans un premier temps, les travaux viseront à sélectionner des colorants fluorescents adaptés à la mesure du pH. Plusieurs critères devront être pris en compte notamment la plage de sensibilité au pH du colorant, la possibilité d'une excitation par l'un de nos lasers. Il faudra étudier en détail l'influence du pH sur les propriétés de la fluorescence des colorants retenus (intensité du signal, durée de vie de la fluorescence, déplacement en longueur d'onde de l'émission de la fluorescence...). Cette étude préliminaire permettra de proposer des solutions adaptées à la mesure du pH. Finalement, un banc expérimental sera mis en place avec l'assistance des encadrants du stage. Il s'agira d'une goutte suspendue dans un écoulement d'air enrichi en CO₂ et/ou de bulles de CO₂ remontant à la surface d'une cuve remplie d'eau. La fluorescence induite par laser sera mise en œuvre afin de mesurer le pH et ainsi quantifier l'absorption de CO₂.

3. Références

- [1] Kong G., Buist K. A., Peters E. A. J. F., Kuipers J. A. M., Dual emission LIF technique for pH and concentration field measurement around a rising bubble, *Exp. Therm. Fluid Sci.*, 93:186–94 (2018).
- [2] Someya S., Bando S., Song Y., Chen B., Nishio M., DeLIF measurement of pH distribution around dissolving CO₂ droplet in high pressure vessel, *Int. J. Heat Mass Transf.*, 48 (12):2508–15 (2005).

Title: Storage of thermal energy via Composite Phase Change Materials (PCM) systems

Supervisors: Christel Métivier christel.metivier@univ-lorraine.fr

Nicolò Sgreva nicolo.sgreva@univ-lorraine.fr

Main fields: Fluid mechanics, energy and thermal systems

Description

1. Context

The thermal energy storage with Phase Change Materials (PCMs) is based on a simple physical principle: during the phase change from solid to liquid, the material absorbs energy (endothermic process); this energy is later released as latent heat of fusion during the solid-to-liquid transition (exothermic process). The fields of application associated with the use of PCMs are numerous [1]: they concern, in particular, solar collectors, heating networks, building, body thermal regulation through their integration into textiles, air conditioning or cooling, etc... Although many studies have focused on their physical properties and their use, there are still many questions about how to optimize their use. In particular, these materials generally have relatively low thermal conductivity, which does not allow for optimal heat transfer during the phase change. Some ways to improve the heat transfer are (1) using PCM-based composite systems [2], and (2) achieving phase change in convective regime [3].

2. Proposed work

This internship aims at investigating experimentally the use PCM based composite systems in which the PCM is embedded in a porous solid matrix with a large porosity (80-90%). The first step of the study aims to characterize the thermo-physical properties of such Composite system (i.e. the PCM-saturated porous matrix). The second step will cover the comparison between conductive and convective regimes. An ideal configuration to investigate the phase change in convective regime is the Rayleigh-Bénard configuration. Investigations can be performed at LEMTA using Nuclear Magnetic Resonance Imaging (NMRI) in order to measure velocity vectors in the liquid PCM, to identify solid/liquid phases (Figure 1) and to obtain temperature fields whenever possible. By identifying the evolution of PCMs liquid and solid phases, the melting front can be tracked over time. This allows us to estimate the enhancement in melting rate due to thermal convection as well as to evaluate the role that the solid porous matrix has on the heat/mass transfer.

The investigation of the properties of PCMs based systems which include nanoparticles is an option to this work.

3. References

[1] K. Pielichowska and K. Pielichowski. Phase change materials for thermal energy storage. *Progress in Materials Science*, 65:67–123, 2014.

[2] S. Zhang, D. Feng, L. Shi, L. Wang, Y. Jin, L. Tian, Z. Li, G. Wang, L. Zhao, and Y. Yan. A review of phase change heat transfer in shape-stabilized phase change

materials (ss-PCMs) based on porous supports for thermal energy storage. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 135:110127, 2021.

[3] J. Noel, C. Metivier, S. Becker, and S. Leclerc. Natural convection in phase change material: Experimental study. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 183: 122047, 2022.

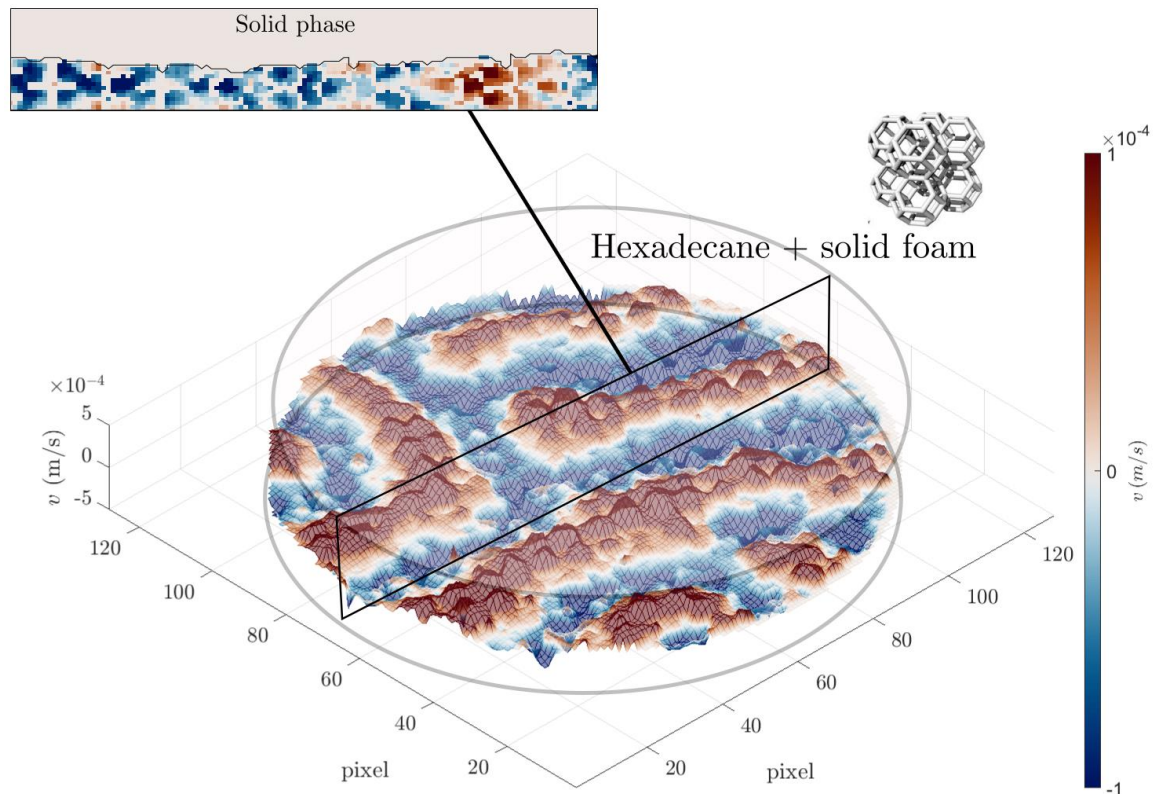


Figure 1. Vertical component of the velocity vector (in color) of a convective liquid PCM in a solid foam

Research group Energy & Transfer

Intitulé : Mobilité de l'eau au sein des matériaux de scellement des galeries de stockage : effet de sollicitations thermo-hydriques.

Encadrant(s) : Sandrine ROSIN-PAUMIER – sandrine.rosin@univ-lorraine.fr

Jean-Christophe PERRIN

Adel ABDALLAH

Le stockage en couche géologique profonde est un mode de gestion des déchets radioactifs envisagé dans plusieurs pays pour les déchets de haute et moyenne activité à vie longue. Il consiste à conditionner ces déchets puis à les placer dans une formation géologique stable en interposant des barrières naturelles et artificielles entre les déchets et l'environnement. Pour ce type de stockage, il est important de pouvoir assurer l'efficacité de l'ouvrage à long terme malgré les conditions particulières dans lesquelles sont placés les sols. En effet, les déchets radioactifs génèrent une augmentation de la température susceptible de modifier les propriétés, notamment hydriques, des sols.

Pour ce qui concerne le projet français (CiGéo), le matériau encaissant, l'argilite du Callovo-Oxfordien (COX), est riche en argile, son utilisation est envisagée pour remblayer les puits et les galeries du futur stockage. Afin d'atteindre les pressions de gonflement nécessaires pour garantir la stabilité de l'ouvrage et une faible conductivité hydraulique (inférieure à 10^{-11} m.s⁻¹, Gatabin et al, 2016), les déblais broyés et tamisés pourraient être mélangés avec de la bentonite (MX80) (Middelhoff 2020). Cependant les propriétés visées ne seront atteintes qu'à proximité de l'état saturé ce qui suppose un temps important et des conditions environnementales favorables.

Ces matériaux de scellement seront soumis à des sollicitations thermo-hydrromécaniques couplées susceptibles de perturber leurs propriétés de transfert. Leur évaluation au sein des matériaux compactés non saturés peut être appréhendée en laboratoire par la courbe de conductivité hydraulique non saturée. Cependant, les méthodes expérimentales sont longues et complexes à mettre en œuvre, particulièrement pour les matériaux gonflants. Au cours de votre projet master, inclus dans le cadre du projet **solliSee1**, vous participerez au développement d'une méthode en laboratoire permettant de déterminer cette courbe en utilisant une méthode de mesure innovante et non intrusive : l'imagerie par résonance magnétique (IRM, figure 1). La mise en place d'un banc d'hydratation permettra la réalisation d'essais pour différents états de compacité afin de prendre en compte l'hétérogénéité potentielle du massif (Figure 2). L'adaptation de la méthodologie permettra à terme de mesurer l'effet de l'application de sollicitations thermo-hydriques couplées sur les propriétés de transferts des massifs argileux compactés.

Aimant supra-conducteur
100 MHz Bruker Biospec 24/40

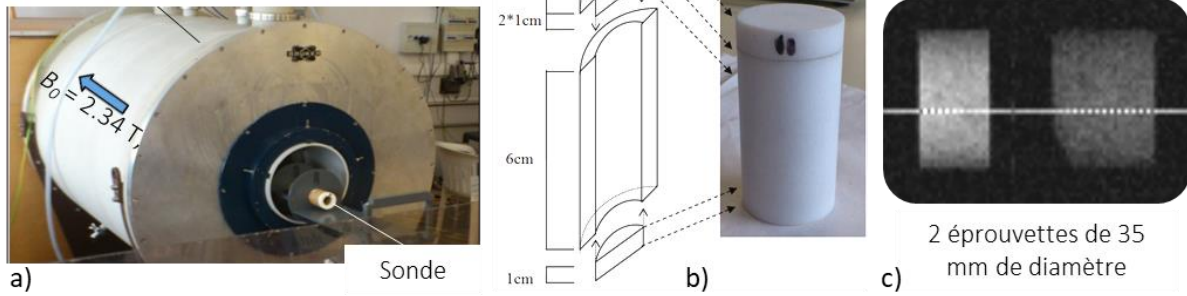


Figure 1 : a) Aimant supra conducteur Bruker Biospec 24/40 permettant la réalisation d'imagerie par résonance magnétique nucléaire b) Echantillon confiné dans une cellule d'essai en téflon c) Image 2D d'une bentonite, portée à deux teneurs en eau différentes, obtenue par la méthode du Single Point Imaging (Rosin-Paumier et al 2013).

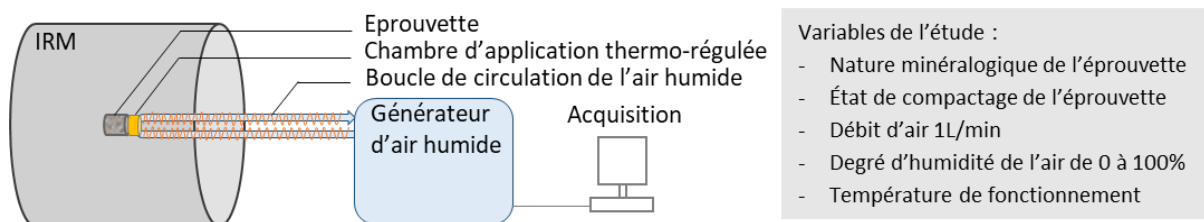


Figure 2 : montage expérimental envisagé et paramètres de l'étude.

L'évaluation de la mobilité de l'eau au sein des éprouvettes soumises à des sollicitations hydriques et thermiques couplées permettra d'obtenir les résultats suivants :

- mise en œuvre de méthodes à temps d'écho très courts (UTE, ZTE). L'application de ces méthodes aux sols représenterait une nouveauté puisqu'elles restent actuellement confinées au domaine médical.
- quantification non intrusive et en continu des mouvements d'eau dans les sols non saturés au cours de l'application de sollicitations hydriques pour une teneur en argile (70% de COX et 30% de bentonite MX80) et un à deux état de compactage différents.
- détermination de la courbe de conductivité hydraulique non saturée pour chaque état et analyse des différences obtenues.
- étude prospective sur l'impact d'une variation couplée thermo-hydrique sur au moins un état de compactage.

Gatabin C, Plas F, Michau N. J. Tech. SFEN Feb 2016, Paris, France.

Hafner S. Magn Reson Imaging. 1994, 12, p1047.

Magat J, 2008. Thèse de doctorat. Structure et matériaux, Laboratoire Central des Ponts et Chaussées.

Middelhoff M. Thèse de doctorat, Université de Lorraine, 2020.

Rosin-Paumier S, Leclerc S, Abdallah A, Stemmelen D. In Khalili, Russell et al. (eds) Unsaturated Soils: Research & Applications Vol.2. CRC Press, 2014, 1155-1162p.

Rosin-Paumier S, Leclerc S, Stemmelen D. 38^e journées du GFHN, Poitiers, 18-21 novembre 2013.

Intitulé : Étude des transferts hydriques du bois humide face à une sollicitation thermique.

Encadrant(s) : **TERREI Lucas**, lucas.terrei@univ-lorraine.fr
PARENT Gilles
ACEM Zoubir
PERRIN Jean-Christophe
LECLERC Sébastien

Domaine : dégradation des matériaux, transfert hydrique, mesure de température.

1. Contexte :

En raison de l'augmentation continue de la population, le besoin de construire ou reconstruire des logements ne cesse de s'accroître. La transition écologique et la modernisation des plans urbains conduisent à trouver de nouvelles alternatives concernant les matériaux de construction. Une volonté politique s'est tournée vers l'utilisation du matériau bois dans la construction des bâtiments de grande hauteur, aussi bien d'habitation que de travail. La part de marché de la construction bois s'est ainsi vue doubler dans les quinze dernières années. En revanche, la prédiction du comportement au feu du bois lors d'un incendie reste encore des questions qui mobilisent industriels et laboratoires.

Les ingénieurs dimensionnent et conseillent quant à l'utilisation du bois dans la construction principalement sur la base de corrélations empiriques et de normes strictes. En effet, puisque ce matériau est combustible, il peut par conséquent participer à la progression de l'incendie dans un ouvrage et compromettre la tenue de la structure. L'étude de la dégradation du bois sous incendie fait partie des thématiques phare de l'équipe feux du LEMTA qui tente de répondre aux besoins sociétaux d'utilisation de ce matériau dans la construction.

Le travail effectué au sein du LEMTA avec des acteurs de l'incendie comme le Centre Scientifique et Technique du Bâtiment (CSTB) ont permis d'établir des réponses sur le comportement au feu du bois à l'échelle du matériau de son inflammation à son extinction en passant par sa dégradation. Les conclusions ont surtout montré que les conditions expérimentales ainsi que l'échantillon étudié pouvaient très fortement influencer les résultats. Les récentes recherches ont pour but de mettre en place un modèle complet de dégradation du bois en trois dimensions couplant la pyrolyse, les transferts de chaleur (impliquant la caractérisation des propriétés thermophysiques : conductivité, Cp, densité... qui varient au cours de la dégradation) ainsi que les transferts de masse (diffusion de l'eau, séchage).

2. Travail proposé :

Les phénomènes qui régissent la dégradation au feu du bois sont nombreux et complexes. Leur prise en compte dans un modèle nécessite une bonne compréhension des différents mécanismes et processus provoquant cette dégradation. Cela passe nécessairement par une mise en évidence expérimentale, de façon couplée ou non, de chacun de ces phénomènes.

C'est dans ce contexte que la personne recrutée pour ce stage s'inscrira afin d'améliorer la compréhension du transfert de l'eau dans le bois pendant une sollicitation thermique. Pour cela, une expérience devra être mise en place afin de disposer un échantillon de bois humide dans une IRM. Cet appareil permet d'observer la distribution d'eau dans des milieux opaques et donc de suivre potentiellement cette distribution au cours du temps. La figure 1 présente un échantillon de bois disposé dans une IRM et séché au cours du temps sous pression. La

sollicitation thermique proviendra quant à elle d'un laser CO2 sur une face. Ces appareils sont déjà disponibles au LEMTA dans l'équipe transverse IRM ainsi que dans l'équipe feux.

Dans un même temps, cette étude passera par une phase importante de bibliographie afin d'établir un plan d'expérience robuste et de participer à la mise en place d'un modèle de transfert hydrique dans le bois. La méthode expérimentale qui sera mise en place devra passer par une phase de validation (faisabilité de la mesure en fonction des teneurs en eau dans le bois et répétabilité).

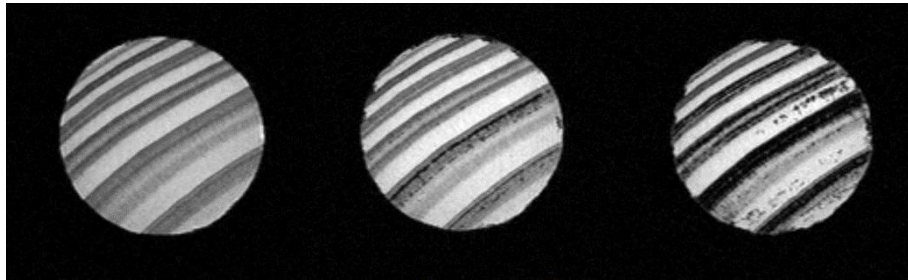


Figure 1 : IRM du séchage sous pression d'un échantillon de sapin douglas
Gauche : état initial, centre : après 30 minutes, droite : après 4h30.

L'étudiant(e) recruté(e) devra faire preuve de curiosité et de connaissances solides dans des thématiques comme les matériaux, les transferts thermiques et hydriques. Ce stage se déroulant entre deux équipes de recherche, l'étudiant(e) devra faire preuve d'organisation dans la planification des expériences (environ une semaine pleine d'expérience par mois avec l'IRM) ainsi que dans le traitement des résultats qui configureront les campagnes d'essai suivantes.

Almeida, G., Leclerc, S., Perre, P. (2008). NMR Imaging of a fluid pathways during drainage of softwood in a pressure membrane chamber. *International journal of multiphase flow*, 34, 312-321

Boonstra, M. (2008). A two-stage thermal modification of wood (Doctoral dissertation, Université Henri Poincaré-Nancy 1).

Passarini, L., Malveau, C., & Hernández, R. E. (2015). Distribution of the equilibrium moisture content in four hardwoods below fiber saturation point with magnetic resonance microimaging. *Wood Science and Technology*, 49(6), 1251-1268.

El Hachem, C., Abahri, K., Leclerc, S., Bennacer, R. (2020). NMR and XRD quantification of bound and free water interaction of spruce wood fibers. *Construction and Building Materials*, 260, 120470.

Cai, C., Javed, M. A., Komulainen, S., Telkki, V. V., Haapala, A., & Heräjärvi, H. (2020). Effect of natural weathering on water absorption and pore size distribution in thermally modified wood determined by nuclear magnetic resonance. *Cellulose*, 27(8), 4235-4247.

Title: study of the turbulence-radiation interaction

Supervisors: Fatmir Asllanaj, fatmir.asllanaj@univ-lorraine.fr

Chérif Nouar, cherif.nouar@univ-lorraine.fr

Main fields: Fluid Mechanics and Radiative Transfer

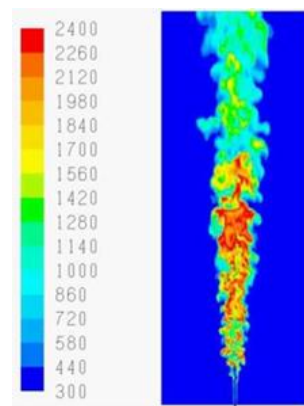
Description

1. Context:

This subject is motivated by the development of alternative sources of energy production, which involve clean, efficient and economical combustion using new fuels that emit fewer pollutants (biofuels, biogas, LPG, H₂, ammonia, etc...). To meet this challenge, one of the actions in the Laboratory aims to study, in terms of modeling and numerical simulation, the turbulent flames in combustion chambers for these alternative fuels. Particular focus is the fine treatment of the turbulence-radiation interaction (TRI) since radiation has a significant impact on the formation of pollutants, and turbulence introduces notable fluctuations in the quantities involved in the calculation of the radiation. A LES (Large Eddy Simulation) approach is adopted, because the simple consideration of the averaged flow fields (Reynolds Averaged Navier Stokes Equations approach) cannot correctly calculate the radiative losses which are strongly influenced by the non-linear character of the fluctuations in temperature and chemical composition.

2. Proposed work:

- to carry out a bibliographical study on the subject;
- to propose a relevant TRI model in the LES context;
- to propose a numerical scheme for the new radiation terms that results from the TRI and implement them in the RAD3D radiation code (developed in the Laboratory);
- to study, using numerical simulations, the influence of the new terms implemented on the thermal radiation behavior in a given combustion gas mixture.



3. References:

- [1] M. Modest and D. Haworth (2016) Radiative Heat Transfer in Turbulent Combustion Systems: Theory and Applications, 1st ed. Springer Briefs in Applied Sciences and Technology.
- [2] P. J. Coelho (2018) Radiative transfer in combustion systems, Handbook of Thermal Science and Engineering.
- [3] P.J. Coelho (2012). Turbulence-radiation interaction: From theory to application in numerical simulations, Journal of Heat Transfer.
- [4] D. Poitou (2009) Modélisation du rayonnement dans la simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, France.
- [5] F. C. Miranda (2019) Large Eddy Simulation of Turbulent Reacting Flows with Radiative Heat Transfer. PhD thesis, Darmstadt, Technische Universität.
- [6] F. Asllanaj et al. (2022). An inverse-based WSGG model for radiative heat transfer in high temperatures. Application to CO₂-H₂O mixtures, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer.

[7] F. Asllanaj et al. (2022) Numerical solutions of radiative heat transfer in combustion systems using a parallel modified discrete ordinates method and several recent formulations of WSGG model, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer.

Title: Study of ballistic-diffusive heat transfer in Si-Ge nanostructured devices

Supervisor: David LACROIX, david.lacroix@univ-lorraine.fr

Main fields: Numerical simulation, Monte Carlo methods, Nanoscale heat transfer

Description

1. Context

The systematic reduction in the size of micro-electronic devices associated with progress in the development of new materials have enabled significant advances in many areas of research. The control of the heating of these nano-devices and the evacuation of the heat released nevertheless remain "The limiting factor" of even more spectacular advances.

2. Work

In this context, this project aims to deepen knowledge of energy transport mechanisms at small space and time scales in semiconductor and nanostructured materials based on silicon and germanium. The objective will be to study the propagation of heat carriers called "phonons" in ultra-fast regimes when the laws of classical physics such as Fourier's law are no longer valid. For this, Monte-Carlo simulations of the transport of energy carriers are envisaged in particular to solve the Boltzmann transport equation (ETB). These approaches will initially allow a better understanding of so-called "ballistic-diffusive" heat transfers in nanostructured materials. These systems can be "super-lattices" (stack of ultra-thin layers of different materials) or materials containing nano-inclusions.

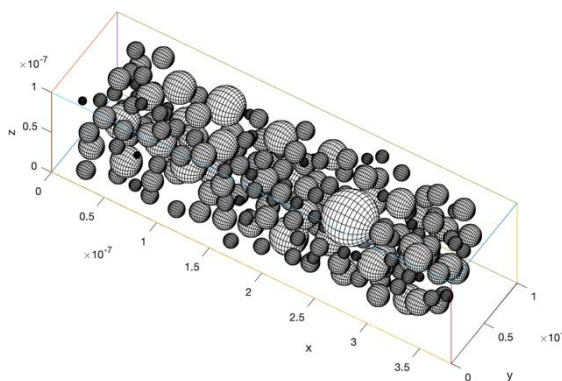


Figure 2: Thin film containing polydispersed nano-inclusions

This project is very clearly oriented towards numerical simulation and the recruited trainee will benefit from the expertise of the team in this field [1-4]. In addition, this research project may continue as part of a laboratory internship and lead to recruitment for a thesis within the Transport in Materials and Nanostructured Interfaces team at the start of the 2023 academic year.

3. References

- [1] K. Termentzidis, V. Giordano, M. Katsikini, E. Paloura, G. Pernot, M. Verdier, D. Lacroix, I. Karakostas, J. Kioseoglou, Enhanced thermal conductivity in percolating nanocomposites: a molecular dynamics investigation, *Nanoscale*, vol. 10, p. 21732-21741, 2018.
- [2] M. Sledzinska, B. Graczykowski, F. Alzina, U. Melia, K. Termentzidis, D. Lacroix, C.M. Sotomayor Torres, Thermal conductivity in disordered porous nanomembranes, *Nanotechnology*, vol. 30, (26), no. 265401, 2019.
- [3] C. Mangold, S. Chen, G. Barbalinardo, J. Behler, P. Pochet, K. Termentzidis, Y. Han, L. Chaput, D. Lacroix, D. Donadio, Transferability of neural network potentials for varying stoichiometry: Phonons and thermal conductivity of M_nX_{n-1} compounds, *J. Appl. Phys.*, vol. 127, (24), 244901, 2020.
- [4] D. Lacroix, M. Isaiev, G. Pernot, Thermal transport in semiconductors studied by Monte Carlo simulations combined with the Green-Kubo formalism, *Phys. Rev. B*, vol. 104, (16), 165202, 2021.

Research group Energy Carriers

Title: Durable anion exchange membrane electrolyser for large-scale green hydrogen production

Supervisors: Gaël Maranzana - gael.maranzana@univ-lorraine.fr
Giuseppe Sdanghi - giuseppe.sdanghi@univ-lorraine.fr

Main Field: Hydrogen

1. Context

Proton Exchange Membrane Water Electrolysers (PEMWE) are a mature solution to produce green hydrogen from renewable energy. However, in an acidic environment, the oxygen evolution reaction is slow and requires an iridium-based catalyst, which prevents the scaling up of PEM technology. Indeed, the annual world production of Iridium is only 7t, whereas double or triple that amount is needed to achieve our objectives in terms of decarbonization of industry and transport. In an alkaline environment, the oxygen evolution reaction is much faster and nickel-based catalysts are very efficient. This is why we are currently looking to develop OH⁻ anion exchange membrane electrolysers (AEMWE). This technology has the advantages of both PEM and standard alkaline electrolysis with liquid electrolyte, but it is not yet mature enough, especially because of the low durability of the anion exchange membranes.

2. Proposed work

The objective of this internship is to set up a new experimental bench to operate and characterize an AEMWE electrolysis cell, and then to benchmark the different electrode and membrane materials available on the market. This internship will be carried out within the framework of the DAEMONHYC project which associates several university laboratories and two industrialists. A PhD thesis is possible. The aim will be to characterize the new materials produced by the project partners and to model the transfer phenomena.

Intitulé : Electrolyseur à membrane échangeuse de protons fonctionnant à très haute densité de courant.

Encadrant(s) : Jérôme Dillet – jerome.dillet@univ-lorraine.fr
Gaël Maranzana - gael.maranzana@univ-lorraine.fr
Giuseppe Sdanghi - giuseppe.sdanghi@univ-lorraine.fr

Domaine : Hydrogène

1. Contexte

Les électrolyseurs de l'eau à membrane échangeuse de protons (PEMEW) sont une solution mature pour produire de l'hydrogène vert à partir d'énergie renouvelable. Ils bénéficient d'une souplesse de fonctionnement qui leur permet d'être couplés directement aux sources variables. Cependant leur coût est élevé car ils nécessitent des catalyseurs à base d'iridium et des matériaux résistants à la corrosion comme le titane. Pour réduire le coût de cette technologie, deux voies sont explorées. Soit on cherche à augmenter la densité de courant de fonctionnement (jusqu'à 10A/cm²), ce qui revient à produire plus d'hydrogène avec le même investissement. Soit on réussit à diminuer la quantité d'iridium à densité de courant constante et on remplace le titane par des matériaux moins onéreux. Les deux voies seront explorées dans le cadre du projet MATHYLDE financé par le PEPR-H2.

2. Travail proposé

Le travail de ce stage est de mettre en place un nouveau banc expérimental permettant de faire fonctionner et de caractériser une cellule d'électrolyse PEMEW à haute densité de courant et haute pression (100bars). Un benchmarking des différents matériaux d'électrode, de diffuseurs poreux et de membrane disponibles dans le commerce sera réalisé. Ce stage sera intégré au projet MATHYLDE qui associe plusieurs laboratoires universitaires (LEPMI, PERSEE, ICGM et ICMMO) et un industriel (Elogen). Une poursuite en thèse est possible et souhaitée. Il s'agira alors de caractériser les performances des nouveaux matériaux produits par les partenaires du projet et de modéliser les phénomènes de transferts de matière et de chaleur.

3. Informations pratiques

Indemnité de stage : 600.60€/mois + inflation

Temps de travail : 35h/semaine – 5 mois

Début du stage : janvier-mars 2023

Title: Analysis of degradation in proton exchange membrane fuel cells (PEMFC)

Supervisors: Julia Mainka , julia.mainka@univ-lorraine.fr

Olivier Lottin , olivier.lottin@univ-lorraine.fr

Main fields: hydrogen, fuel cells, energy, impedance spectroscopy

Description

1. Context

Proton Exchange Membrane Fuel Cells (PEMFCs) are now mature enough for commercial deployment in automotive [1] or rail [2] and maritime applications. Current systems operate up to about 80°C. Under these conditions however, their power density and durability still appear insufficient, and their cost remains too high in relation to manufacturers' objectives [3]. One way to overcome these shortcomings is to simplify PEMFC systems, for example by increasing the operating temperature to facilitate cooling. With current perfluorosulphonated (PFSA) ionomer materials, it is possible to raise the temperature of PEMFCs to nearly 100°C. At such high temperature, the performance of electrode catalysts is better than at lower temperatures [5, 6]. However, at higher temperatures, the kinetics of materials degradation reactions are also expected to be higher, which necessitates increased robustness of the membrane-electrode assemblies.

2. Work proposed

This is why the main objective of this work is to analyze and understand the degradation mechanisms of a PEMFC operating at the highest possible temperatures (up to 90°C for the time being). This work is part of the PEMFC95 project of the French National Research Agency (ANR), which aims to develop materials capable of operating sustainably at 95°C, while limiting the use of platinum metals; it could be continued in the form of a PhD thesis from October 2023.

Initially, the aim will be to use the experimental tools developed at LEMTA (impedance spectroscopy, segmented and instrumented cells, etc.) to gain access to the local operating conditions of fuel cells, in order to characterize their performance and ageing [7]. Modelling work will also be carried out where necessary to better understand and interpret the experimental data [8]. This will be based mainly on the development of electrochemical impedance spectroscopy (EIS) models and parameter identification techniques.

3. References

[1] A.G. Olabi, T. Wilberforce, M.A. Abdelkareem, Fuel cell application in the automotive industry and future perspective, *Energy*, 214 (2021).

[2] Alstom unveils Coradia iLint hydrogen fuel cell powered train for European regional market, *Fuel Cells Bul.*, 2016 (2016) 1.

[3] R.L. Borup, A. Kusoglu, K.C. Neyerlin, R. Mukundan, R.K. Ahluwalia, D.A. Cullen, K.L. More, A.Z. Weber, D.J. Myers, Recent developments in catalyst-related PEM fuel cell durability, *Current Opinion in Electrochemistry*, 21 (2020) 192.

[4] S.J. Paddison, Proton Conduction in PEMs: Complexity, Cooperativity and Connectivity, in: S.J. Paddison, K.S. Promislow (Eds.) Device and Materials Modeling in PEM Fuel Cells, Springer New York, New York, NY, 2009, pp. 385-412.

[5] W. Vielstich, A. Lamm, H.A. Gasteiger, Handbook of Fuel Cells, Wiley, Chichester, 2003.

[6] H.A. Gasteiger, W. Vielstich, H. Yokokawa, Handbook of Fuel Cells, John Wiley & Sons Ltd, Chichester, 2009.

[7] S. Touhami, L. Dubau b, J. Mainka, J. Dillet, M. Chatenet, O. Lottin, Anode aging in polymer electrolyte membrane fuel Cells I: Anode monitoring by ElectroChemical impedance spectroscopy, J. Pow. Sources, 481, 228908, 2021

[8] S. Touhami, J. Mainka, J. Dillet, S. Ait Hammou Taleb and O. Lottin, Transmission Line Impedance Models Considering Oxygen Transport Limitations in Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cells, J. Electrochem. Soc., vol. 166, no. 15, pp. F1209-F1217, 2019.

Intitulé : Modélisation et étude expérimentale de l'échauffement d'un transistor MOSFET

Encadrants : Nicolas BLET, nicolas.blet@univ-lorraine.fr
Ali EL ARABI, ali.el-arabi@univ-lorraine.fr

Domaine : Transfert de chaleur, Simulation numérique, métrologie thermique

Descriptif

1. Contexte

La puissance électrique produite par les éoliennes et les panneaux solaires peut être très instable et surtout fluctuante. Or, au sein d'un réseau électrique, la continuité de service est indispensable et la délivrance d'un signal électrique conforme aux exigences du réseau est cruciale.

Au sein d'un réseau électrique intelligent « Smart grid », l'électricité peut être produite sur place, importée ou exportée vers le réseau. L'électricité va pouvoir transiter dans les deux sens. Pour ce faire, la mise en place de convertisseurs électroniques est indispensable. Nous citons à titre d'exemple l'onduleur qui va permettre de rendre l'électricité produite par un panneau photovoltaïque (en courant continu) exploitable à l'utilisation domestique (alternative). De plus, la mise en place des convertisseurs d'électronique de puissance (à base de transistors) va permettre un fonctionnement à la puissance maximale. De ce fait, un contrôle électrique optimal doit être apporté. Dans un fonctionnement nominal, l'acheminement de la puissance électrique au sein de ces composants engendre des pertes électriques (pertes de commutation et de conduction). Cette puissance électrique est perdue sous forme de chaleur et conduit à un échauffement du composant (la température pouvant dépasser les 100°C).

Ces composants subissent ainsi des cycles de chauffage / refroidissement ce qui accélère leur vieillissement. De plus, la température de ces composants doit rester inférieure à une température seuil de l'ordre de 140°C (sous peine de dégradation).

Ainsi, pour permettre un meilleur contrôle de ces composants, une estimation de la température au niveau des puces (appelée température de jonction) devient primordiale. Malheureusement, celle-ci est difficilement accessible via des mesures directes intrusives. Le but du projet de recherche est ainsi de déterminer cette température à partir de mesures externes et d'un modèle thermique du composant.

2. Travail proposé

Nous proposons dans le cadre de ce stage un travail de simulation numérique sous le logiciel COMSOL Multiphysics ainsi qu'une étude expérimentale. Les principales étapes du stage, en soutien à des travaux de thèse, sont les suivantes :

- ➔ Modélisation thermique d'un seul transistor MOSFET en 3D en régime permanent et transitoire sous COMSOL Multiphysics.
- ➔ Modélisation thermique d'un convertisseur (redresseur par exemple) entier constitué de trois transistors et de trois diodes sous COMSOL Multiphysics.
- ➔ Etude expérimentale : mesure de la température de jonction par thermographie infrarouge pour un seul transistor, pour différentes valeurs de la puissance électrique et pour différents composants.

Title: Manufacturing and characterization of electrodes for anion exchange membrane fuel cells (AEMFCs)

Supervisors: Feina XU, feina.xu@univ-lorraine.fr

Anthony DESSALLE, anthony.dessalle@univ-lorraine.fr

Main fields: Process engineering, materials chemistry, electrochemistry

Description

1. Context

The Hydrogen and Electrochemical Systems (HSE) team of LEMTA is specialized in the fabrication and characterization of electrochemical systems, especially in PEMFC (Proton Exchange Membrane Fuel Cell, Fig.1 left). Through the thesis of Z. TURTAJEVA [1,2], the development of AEMFC (Fig.1 right) was initiated as well as the manufacturing of electrodes for ions exchange membrane fuel cells (PEMFC and AEMFC), thanks to the acquisition of an ultrasonic spray coating bench.

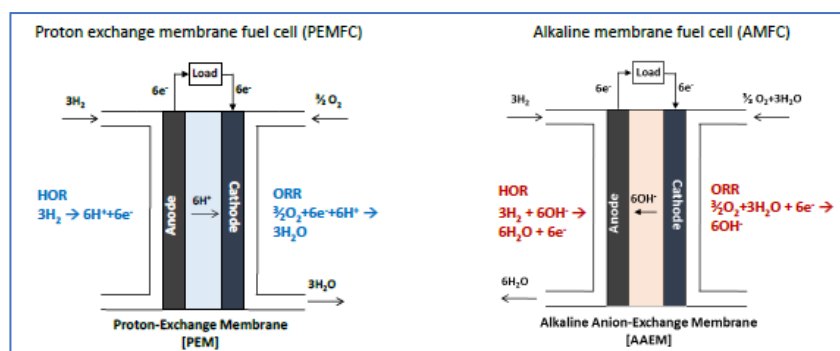


Figure 1 : PEMFC vs. AEMFC [3]

In this context, we would like to improve our know-how in the construction of electrodes as well as in the development of new catalysts for fuel cells. The latter are currently being developed at the IJL in the framework of Anthony Dessalle's thesis work.

2. Work

The work required will be multidisciplinary and experimental, ranging from the formulation of catalyst inks to fuel cell tests. Several doped-carbon catalysts containing non-precious metal will be tested during this internship and compared to the Pt/C reference catalyst. The work plan for this internship is presented below and will be detailed during the interview.

- 1) Formulation and preparation of catalyst inks for a given catalyst.
- 2) Electrode fabrication with the ultrasonic spray coating bench.
- 3) Physico-chemical and electrochemical characterization of the prepared electrodes.
- 4) Fuel cell tests and data analysis.

This broad research program offers the opportunity for a motivated and curious student to work on a multidisciplinary topic and to develop a wide range of skills. Moreover, the work could be directed differently based on the results and interest of the student and supervisors.

The internship, lasting 6 months, is based at LEMTA (UMR 7563) in Nancy.

Profiles sought:

- Master 2 education, if possible in process engineering, materials chemistry or electrochemistry.
- Knowledge in electrochemistry, process and catalytic materials would be appreciated.
- A good basis in English.
- Rigor, curiosity, critical thinking, teamwork, versatility, willingness to learn

Keywords: carbon-based catalysts, catalyst ink, electrode fabrication, physicochemical and electrochemical characterization, ion exchange membrane fuel cells (PEMFC and AEMFC).

3. References

- [1] : Turtayeva, Zarina, Feina Xu, Jérôme Dillet, Kévin Mozet, Régis Peignier, Alain Celzard, et Gael Maranzana. « Manufacturing Catalyst-Coated Membranes by Ultrasonic Spray Deposition for PEMFC: Identification of Key Parameters and Their Impact on PEMFC Performance ». International Journal of Hydrogen Energy 47, n° 36 (29 avril 2022): 16165-78. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.03.043>.
- [2] : Turtayeva, Zarina, thesis 2022.
- [3]: Slade Robert C.T. et al, Alkaline membrane fuel cells (Chap2), Encyclopedia of sustainability science and technology, 2012, Springer, DOI:10.1007/978-1-4419-0851-3.

Research group MRI for Engineering

Title: Study of micro-mixers by MRI (magnetic resonance imaging)

Supervisors: **Jean-Christophe Perrin (LEMTA*)**, jean-christophe.perrin@univ-lorraine.fr

Sébastien Leclerc (LEMTA), sebastien.leclerc@univ-lorraine.fr

Rainier Hreiz (LRGP)**, rainier.hreiz@univ-lorraine.fr

Jean-Marc Commenge (LRGP), jean-marc.commenge@univ-lorraine.fr

* Laboratory of Energies Theoretical and Applied Mechanics

** Reactions and Chemical Engineering Laboratory

Main fields: milli-fluidics, micro-mixing, fluid mechanics, MRI

Description

1. Context

The LEMTA laboratory develops MRI (Magnetic Resonance Imaging) methods to study flows in milli-fluidic systems. These systems manipulate fluids at a characteristic scale of the order of 1 millimeter with applications (for example) in micro-mixing. The industrial applications are in the field of synthetic chemistry and process engineering. Recently, Feryal Guerroudj's thesis work led to the development of an MRI microprobe device capable of characterizing the 3D velocity field in a micro-mixer (Figure 1). The study, conducted in collaboration with the LRGP laboratory, was validated by computational fluid dynamics (CFD) simulations using the Fluent® software [1].

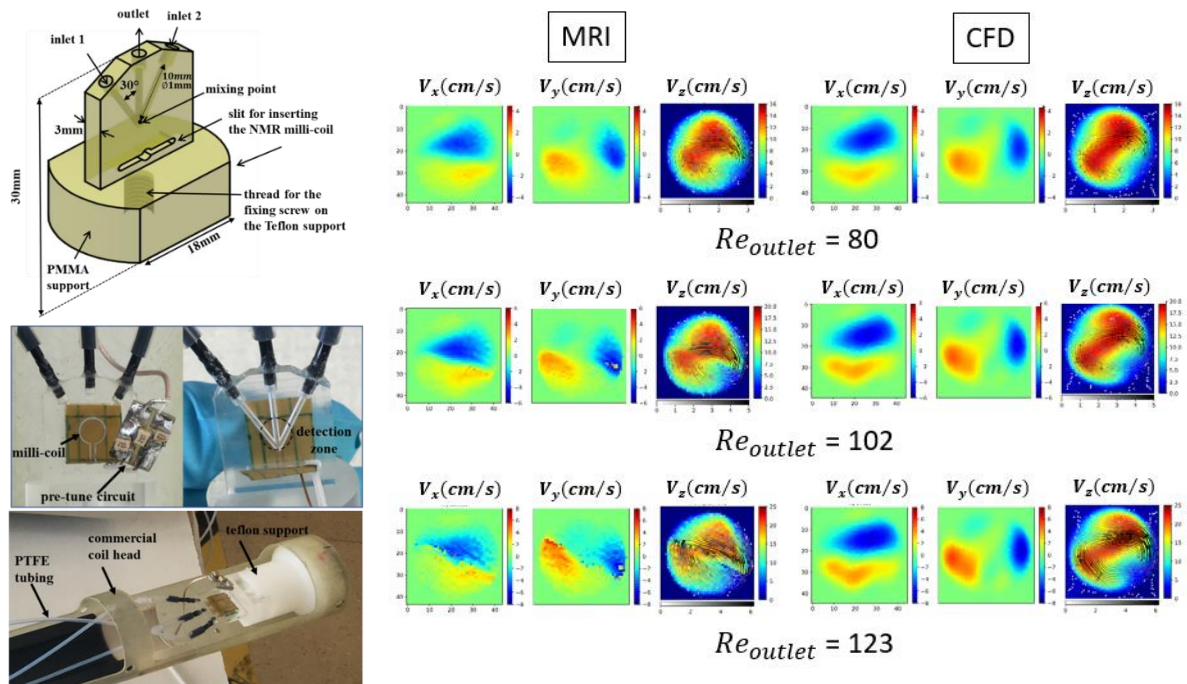


Figure 1

Left: experimental setup, including the micro-mixer (CAD drawing on top) and the instrumentation for the MRI measurements (photos).

Right: MRI images of the 3 components of the liquid velocity in a circular section of the micro-mixer outlet channel 2 mm downstream of the mixing point for different values of the Reynolds number (Re). The comparison is made with the CFD simulation under Fluent.

2. Proposed work

We would like to continue the study by performing the MRI characterization of the concentration field after the mixing point and make the comparison with the CFD simulations. The experiments will be performed on an NMR spectrometer providing a static magnetic field of 14.1 Tesla. Two streams of water will be sent at controlled rates, one of which will be labeled with a contrast agent. Concentration maps will be measured in different sections of the micro-mixer outlet channel for different liquid flow rates.

Depending on the interest of the student, the internship work may include the modeling of the behavior of the nuclear magnetization in the flow (under python and COMSOL Multiphysics). This approach would allow to better understand the limitations of the MRI measurement when the fluid velocity increases in the micro-mixer.

3. References

[1] Guerroudj F., Guendouz L., Hreiz R., Commenge J-M., Bianchin J., Morlot C., Le T-D., Perrin J-C., 3D Magnetic resonance velocimetry for the characterization of hydrodynamics in microdevices: application to micromixers and comparison with CFD simulations; soumis pour publication à *Chemical Engineering Science* (10/2022).