

Stage de M2 au GPM de Rouen, France « Développement d'une approche de Mushy-Layer pour modéliser la congélation de l'eau saline dans un réacteur à paroi froide »

Mots clef : approche mushy-layer, solidification, désalinisation, simulation numérique, adaptation changement climatique.

Contexte & objectif : La dégradation de la qualité de l'eau douce, la modification de sa répartition terrestre en raison du réchauffement climatique et les besoins accrus de l'homme font que l'eau douce devient une ressource complexe à manager. La désalinisation de l'eau de mer est une des solutions envisagées actuellement pour gérer ces besoins croissants en eau douce. Dans ce cadre, la congélation sur paroi froide (ILC) est un procédé innovant envisagé pour la désalinisation de l'eau de mer, en raison de sa faible demande énergétique et de son absence de prétraitements de l'eau en amont. Ce procédé sépare l'eau de mer en deux phases (une phase solide (glace) et solution saline concentrée), en y appliquant des conditions opératoires proches de l'eutectique. Ce procédé n'est cependant pas encore mature technologiquement, car la pureté de la glace s'avère hétérogène, ce qui limite fortement le rendement du procédé. Une condition préalable à l'optimisation de ce procédé, est donc de comprendre finement les mécanismes de solidification de la glace dans l'eau salée, et de prédire la morphologie et la cinétique de croissance de la couche de glace dans le réacteur ILC. Dans cet objectif, ce stage de M2 vise à développer une approche de type Mushy-Layer, pour simuler numériquement la congélation de l'eau saline dans des conditions proches du réacteur ILC.

Méthode : La modélisation numérique de la solidification d'un mélange fondu repose traditionnellement sur des approches mésoscopiques de type champ de phase (CP), et des approches macroscopiques à suivi d'interface. D'une part, les approches CP permettent de reproduire finement les morphologies et cinétiques de croissance de la glace, mais sur des échelles spatiales insuffisantes pour généraliser à l'intégralité du dispositif expérimental. D'autre part, les approches macroscopiques sont incapables de reproduire les hétérogénéités de croissance de la glace à l'origine de la limitation du rendement du réacteur. Dans ce cadre, l'approche de Mushy-Layer (MLM) est un bon compromis entre ces deux approches. Le principe de ce modèle est de décrire le front de solidification comme un milieu poreux où la glace et l'eau salée coexistent, et ce, par le biais de trois variables continues (la fraction de glace, la température, et la concentration en soluté -sel-) dont l'évolution est imposée par les équations de conservation de la quantité de matière et de l'énergie. Un trait distinctif de l'approche MLM, est de tenir compte de l'influence de la convection de l'eau salée au sein des pores de la glace sur la morphologie de la couche de glace, tout en atteignant des échelles spatiales suffisantes pour décrire le procédé de solidification sur un domaine conséquent du réacteur. L'objectif du stage sera de proposer une approche MLM adapté à la solidification de l'eau salée, d'implémenter informatiquement ce modèle, et de réaliser des simulations de croissance de la glace dans des conditions proches de celle du réacteur ILC. Le modèle pourra être calibré et validé sur des simulations CP et des données expérimentales disponibles.

Profil du candidat ou de la candidate : Étudiant ou étudiante en cycle master disposant de connaissances solides en génie des procédés ou en science des matériaux, et présentant un intérêt marqué pour la simulation numérique. Des compétences en programmation informatique sont souhaitables.

Informations pratiques : Stage d'une durée de 5 mois à partir de mars 2025, encadré par Gilles Demange (Maître de Conférences) et Aurélie Galfré (Maîtresse de Conférences) au sein de l'équipe « Modélisation Multi-Échelles des Transitions de Phase » (MMTP) du Groupe de Physique des Matériaux (GPM, UMR 6634, Université de Rouen-Normandie). Le GPM est un laboratoire reconnu pour l'étude des matériaux, tant sur le plan de la modélisation numérique que de l'instrumentation scientifique. Contacts : gilles.demange@univ-rouen.fr, aurelie.galfre@univ-lyon1.fr
