

PROPOSITION DE SUJET DE THESE

Intitulé : Établissement du lien entre la composition chimique d'un carburéacteur et de la valeur des propriétés physico-chimiques et modélisation de celles-ci par « machine learning »

Référence : **MFE-DMPE-2024-14**
(à rappeler dans toute correspondance)

Début de la thèse : octobre 2024

Date limite de candidature : juin 2024

Mots clés

Carburéacteur, composition chimique, propriétés physico-chimiques, caractérisation, modélisation

Profil et compétences recherchées

Master recherche et/ou ingénieur chimiste

Présentation du projet doctoral, contexte et objectif

Les normes internationales de « qualité carburant » permettent d'assurer la compatibilité de celui-ci avec l'aéronef et le moteur. Ainsi, les propriétés physico-chimiques du carburéacteur sont encadrées. Malgré des limites bien définies, la plupart d'entre elles sont fondées sur l'expérience et reflètent des solutions à des problèmes passés car le lien entre la composition du carburant et son comportement à l'usage n'est pas encore totalement compris, ceci d'autant plus que le carburant aéronautique est un mélange de centaines d'hydrocarbures. Par ailleurs et dans le but de réduire l'empreinte carbone du secteur de l'aviation, des carburants aéronautiques durables (SAF) sont produits et étudiés depuis de nombreuses années et plusieurs procédés de fabrication ont déjà été certifiés. La diversité des matières premières à partir desquelles ces carburants sont produits génère également une variété de composition chimique. Par exemple, les kérosènes paraffiniques synthétiques (SPK) sont dépourvus d'aromatiques, tandis que d'autres peuvent n'être constitués que de quelques molécules différentes. Cet écart de composition chimique avec un carburant d'origine fossile repose à nouveau de façon accrue la question de lien composition chimique/valeur de la propriété physico-chimique d'intérêt.

Cela confirme le fait que pour progresser dans un domaine où la composition des carburants sera de plus en plus diversifiée, il faut définir des moyens de calculer avec précision les valeurs des propriétés physico-chimiques importantes à partir des constituants des carburants. À long terme, cette capacité jouera également un rôle clé dans la conception de nouvelles générations de carburants présentant de meilleures caractéristiques et performances.

La démarche qui sera adoptée dans cette thèse sera d'initier les travaux à partir de quelques molécules modèles représentatives, de les mélanger et de les caractériser au moyen des dispositifs disponibles au laboratoire du DMPE. Cela permettra d'identifier les paramètres influençant une propriété. Il faudra ensuite se rapprocher de plus en plus d'un carburant réel. La détermination de la composition chimique de carburants réels sera un axe fort du travail de thèse et sera réalisé au moyen d'une GCxGC/TOF-MS.

En parallèle, un travail de modélisation des propriétés basé sur le « machine learning » sera réalisé en collaboration avec le DTIS.

L'objectif final de cette thèse est de mettre en place des outils de modélisation des valeurs des propriétés physico-chimiques, que ce soit pour des carburants d'origines fossile ou alternative.

Collaborations envisagées

Sans objet

Laboratoire d'accueil à l'ONERA

Département : Multi-Physique pour l'Energétique

Lieu (centre ONERA) : Palaiseau

Contact : M. Sicard

Tél. : 86052

Email : mickael.sicard@onera.fr

Directeurs de thèse

Nom : Mickael Sicard

Laboratoire : DMPE

Tél. : 01 80 38 60 52

Email : mickael.sicard@onera.fr

Nom :

Laboratoire : DTIS

Tél. :

Pour plus d'informations : <https://www.onera.fr/rejoindre-onera/la-formation-par-la-recherche>