



Titre de la thèse :

Influence des couches limites sur la mesure des délais d'auto-inflammation en tube à choc haute pression – Application à la cinétique des combustibles issus de la biomasse – Simulation et expérimentation

Laboratoire d'accueil :

Laboratoire DRIVE
49 rue Mademoiselle Bourgeois
58000 Nevers – France

Spécialité du doctorat préparé : Energétique

Mots-clefs : Tube à choc, délai d'autoinflammation, biomasse, couches limites, CFD, cinétique

Descriptif détaillé de la thèse :

L'épuisement des combustibles fossiles et le changement climatique, causé en partie par les émissions issues de leur combustion, représentent des défis majeurs de la société contemporaine. Les carburants alternatifs dérivés de bioressources (biocarburants, dihydrogène, ammoniac) apparaissent comme une des solutions prometteuses pour surmonter ces défis, notamment dans le secteur des transports, en particulier pour les poids lourds, et les procédés énergétiques.

Bien que la combustion de certains carburants alternatifs à haute température et basse pression ait été largement étudiée dans la littérature via des réacteurs fondamentaux tels que les flammes laminaires et les réacteurs parfaitement agités [1,2], les recherches sont limitées dans des conditions de haute température et de haute pression, similaires à celles opérant dans les réacteurs thermiques comme les moteurs à combustion interne, les turbines à gaz et les turboréacteurs (400-2000K, 1-100Bar) [3]. Le tube à choc est l'un des réacteurs fondamentaux qui permet d'étudier la combustion de carburants alternatifs à de telles conditions par la mesure de délais d'auto-inflammation [4], la mesure de profils d'espèces intermédiaires [5], puis permet la validation de modèles cinétiques afin de comprendre la dégradation de ces carburants [6]. L'une de nos dernières études [7] a montré que le délai d'auto-inflammation mesuré dans le tube à choc peut être impacté par des couches limites [8] dans certaines conditions et affecter la prédiction des modèles cinétiques.

Partant de ce constat, l'objectif de la thèse sera de caractériser l'impact des couches limites sur les mesures de délai d'auto-inflammation dans le tube à choc du laboratoire DRIVE. Cette caractérisation permettra ensuite l'étude de la cinétique de combustion de composés issus de la biomasse. Le travail se réalisera en quatre temps :

1. Une étude bibliographique approfondie sera réalisée, s'appuyant sur des bases de données telles que Web of Sciences, pour examiner les travaux antérieurs sur les expériences en laboratoire et la modélisation CFD (Computational Fluid Dynamics) ainsi que la modélisation cinétique.

2. La modélisation CFD sera effectuée à l'aide du logiciel Ansys Fluent pour évaluer l'impact des couches limites sur le délai d'auto-inflammation dans le tube à choc du DRIVE.
3. Une série d'expériences sera menée au laboratoire DRIVE pour mesurer le délai d'auto-inflammation d'un mélange bio-carburant/O₂/Ar dans un tube à choc à haute pression (20-40Bar) et température (900-1600K).
4. À partir des données obtenues, une modélisation cinétique sera réalisée en utilisant Ansys Chemkin-Pro, intégrant les résultats de la modélisation CFD pour approfondir la compréhension de la cinétique d'oxydation du biocarburant.

Références bibliographiques

- [1] L.-S. Tran, P.-A. Glaude, R. Fournet, F. Battin-Leclerc, Experimental and Modeling Study of Premixed Laminar Flames of Ethanol and Methane, *Energy Fuels* 27 (2013) 2226–2245.
- [2] P. Dagaut, C. Togbé, Experimental and Modeling Study of the Kinetics of Oxidation of Ethanol–Gasoline Surrogate Mixtures (E85 Surrogate) in a Jet-Stirred Reactor, *Energy Fuels* 22 (2008) 3499–3505.
- [3] L.-S. Tran, O. Herbinet, H.-H. Carstensen, F. Battin-Leclerc, Chemical kinetics of cyclic ethers in combustion, *Progress in Energy and Combustion Science* 92 (2022) 101019.
- [4] Y. Uygun, S. Ishihara, H. Olivier, A high pressure ignition delay time study of 2-methylfuran and tetrahydrofuran in shock tubes, *Combustion and Flame* 161 (2014) 2519–2530.
- [5] A. Hamadi, L. Piton Carneiro, F.-E. Cano Ardila, S. Abid, N. Chaumeix, A. Comandini, Probing PAH Formation from Heptane Pyrolysis in a Single-Pulse Shock Tube, *Combustion Science and Technology* 195 (2023) 1526–1542.
- [6] Y. Zhang, H. El-Merhubi, B. Lefort, L. Le Moyne, H.J. Curran, A. Kéromnès, Probing the low-temperature chemistry of ethanol via the addition of dimethyl ether, *Combustion and Flame* 190 (2018) 74–86.
- [7] H.-Q. Do, B. Lefort, Z. Serinyel, L. LeMoyne, G. Dayma, Comparative study of the high-temperature auto-ignition of cyclopentane and tetrahydrofuran, *International Journal of Chemical Kinetics* 56 (2024) 199–209.
- [8] D. Nativel, S.P. Cooper, T. Lipkowitz, M. Fikri, E.L. Petersen, C. Schulz, Impact of shock-tube facility-dependent effects on incident- and reflected-shock conditions over a wide range of pressures and Mach numbers, *Combustion and Flame* 217 (2020) 200–211.

Profil demandé :

- Ingénieur/Master en génie des procédés ou en mécanique des fluides/énergétique avec si possible des connaissances en cinétique chimique.
- Anglais courant, capacité à travailler en équipe
- Envoyer CV, lettre de motivation, lettre de recommandation de vos encadrants, bulletins de note de première et deuxième année de diplôme de Master ou deux dernières années de diplôme d'ingénieur aux encadrants et directrice de thèse.

Financement : MESRI Etablissement

Dossier à envoyer avant le **25 mai 2024** (Entretien fin mai, début juin)
Début du contrat : 1^{er} Octobre 2024
Salaire mensuel brut : 1975€

Direction de la thèse :

Benoîte Lefort, Professeure des universités
Benoite.Lefort@u-bourgogne.fr

Encadrement de la thèse : co-encadrant(s) :

Julien Jouanguy, Maître de conférences
Julien.Jouanguy@u-bourgogne.fr
Hong-Quan Do, Maître de conférences
Hong-Quan.Do@u-bourgogne.fr