

Avis de Soutenance

Monsieur Thomas Epalle

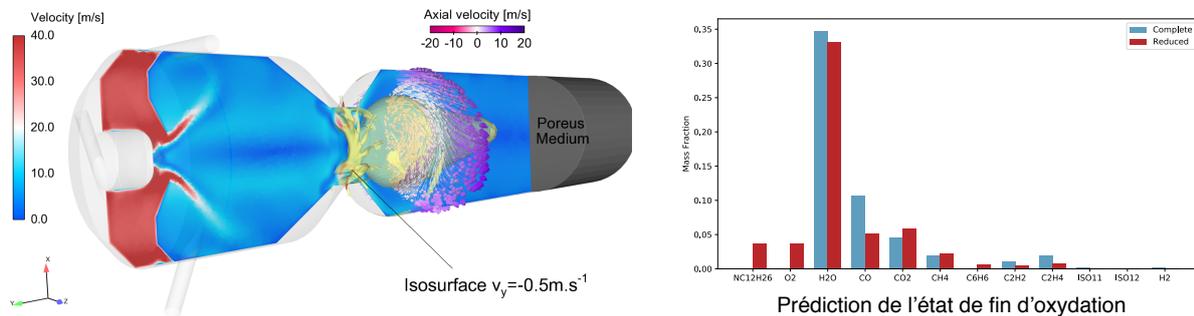
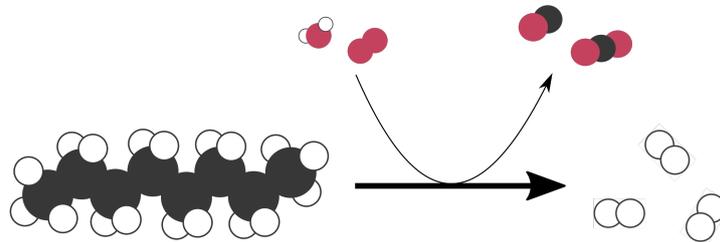
Soutiendra publiquement ses travaux de thèse intitulés

Simulation numérique de reformeur autothermique de diesel

dirigés par Monsieur Olivier Gicquel

Le **mardi 23 avril** à 14h00

A CentraleSupélec, 3 rue Joliot-Curie, 91192 Gif-sur-Yvette Cedex
Théâtre Rousseau (Bâtiment Bouygues)



Composition du jury

M. Alessandro PARENTE
M. Guillaume RIBERT
M. Stéphane JAY
M. Guillaume DAYMA

Professeur, Université Libre de Bruxelles
HDR Maître de Conférence, INSA de Rouen
Ingénieur de recherche, IFP Energies Nouvelles
Professeur, Institut de Combustion Aérodynamique
Réactivité et Environnement (ICARE)

Rapporteur
Rapporteur
Examinateur
Examinateur

Mme. Mélody CAILLER
M. Olivier GICQUEL
M. Nasser DARABIHA
M. Julien CANCES
M. Fabien GAUGAIN

Safran Tech
Professeur, CentraleSupélec
Professeur, CentraleSupélec
Chef de projet, Naval Group
Docteur Ingénieur, Naval Group

Invitée
Directeur de thèse
Co-directeur de thèse
Invité
Invité

Titre : Simulation numérique de reformeur autothermique de diesel

Mots clés : reformage autothermique, diesel, mécanismes globaux, algorithmes évolutionnaires

Résumé : Le reformage autothermique, dans lequel une oxydation air carburant permet d'initier les réactions de formation d'hydrogène à partir de carburant et d'eau, semble une voie prometteuse pour la synthèse d'hydrogène à bord de navires. Son application au diesel, carburant majoritairement utilisé dans le secteur maritime, bien que moins bien connue académiquement que celle du méthane, permet une opérabilité du vaisseau sur l'ensemble du globe. Cependant les réacteurs associés sont particulièrement sujets au dépôt de carbone, néfaste pour leur durabilité, et requièrent alors une attention toute particulière au niveau des zones de mélange lors de leur conception. Dans les cas d'écoulements fortement tridimensionnels, une approche RANS couplée à un schéma cinétique décrivant les espèces gazeuses, est le plus souvent utilisée. Ce schéma consiste alors soit en un nombre succinct de réactions empiriques, au risque de se montrer peu précis sur les niveaux de polluants, ou au contraire en des schémas d'une cinquantaine d'espèces issus de la réduction automa-

tique de schémas complets, qui restent cependant trop lourds à utiliser lors d'une phase de conception. L'objectif de la thèse est alors de proposer une méthodologie pour décrire l'impact d'une géométrie sur les niveaux de polluants compatibles avec les outils habituellement utilisés dans le milieu industriel. Ainsi, la description du couplage chimie-écoulement est réalisée par le biais des logiciels Fluent[®] et de la suite Chemkin[®] de ANSYS[®]. Après une analyse de la chimie du reformage autothermique du diesel, une méthode de génération de schémas globaux d'une dizaine d'espèces à partir d'un schéma détaillé est proposée. Elle est, par la suite appliquée avec succès à l'oxydation partielle du n-dodécane. Le schéma est alors utilisé dans la première simulation réactive de reformeur auto-thermique avec injection de diesel liquide réalisée à ce jour. Malgré les difficultés de validation dues au manque de données expérimentales et aux limitations des logiciels imposés, les résultats obtenus sont encourageants.

Title : Numerical simulation of diesel autothermal reformer

Keywords : autothermal reforming, diesel, global schemes, evolutionary algorithms

Abstract : Autothermal reformers use fuel-air oxidation to ensure on-board production of hydrogen from fuel and water. The use of diesel instead of better-known methan, permits the ships to be refuelled all around the world. These systems show strong sensitivity to carbon deposit which reduces their lifetime. Good knowledge of the fuel air mixing is thus required. Academic description of such tridimensional systems usually relies on the application of a RANS simulation coupled with gaseous chemical kinetics mechanisms. These mechanisms can then consist of a few empirical reactions, or of quite large schemes, with more than 50 species derived automatically from big detailed schemes. The resulting description is either not precise enough, or too computationally expensive to be used during the design process. This

thesis thus aims to develop an industrially compatible methodology to describe the impact of the design geometry on pollutant formation. ANSYS[®] software such as Fluent[®] and Chemkin[®] are then used to perform the simulation. An original method of limited size mechanism derivation from larger chemical schemes is proposed. It is succesfully applied to the generation of a partial oxidation mechanism of n-dodecane, from the results of diesel reforming chemical analysis. The resulting scheme is then applied to the liquid injection diesel autothermal reformer reactive simulation. Even if validation difficulties result from the lack of experimental data and limitations of the software, it remains the first simulation of this kind in the literature, to our knowledge. Promising results are obtained.

