

## Monsieur Florian HURAUULT

Energétique

Soutiendra publiquement ses travaux de thèse intitulés

*Caractérisation expérimentale et numérique du phénomène de cliquetis pour des mélanges ammoniac/air et ammoniac-hydrogène/air dans les moteurs à allumage commandé*

Travaux dirigés par Madame Christine ROUSSELLE et Monsieur Fabrice FOUCHER

Ecole doctorale : Energie, Matériaux, Sciences de la Terre et de l'Univers - EMSTU

Unité de recherche : PRISME - Laboratoire Pluridisciplinaire de Recherche en Ingénierie des Systèmes et Mécanique Energétique

### **Soutenance prévue le vendredi 19 juin 2026 à 10h00**

Lieu : Polytech Orléans, hall Pascal, 8 rue Léonard de Vinci, 45072, Orléans La Source

Salle : Amphithéâtre Cabannes, Pascal 005

### **Composition du jury proposé**

|                         |                             |                                       |                       |
|-------------------------|-----------------------------|---------------------------------------|-----------------------|
| Mme Christine ROUSSELLE | Professeur des universités  | Université d'Orléans                  | Directrice de thèse   |
| M. Fabrice FOUCHER      | Professeure des universités | Université d'Orléans                  | Co-directeur de thèse |
| M. Pierre BREQUIGNY     | Maître de conférences       | Université d'Orléans                  | Co-encadrant de thèse |
| M. William NORTHROP     | Professeur des universités  | University of Minnesota               | Rapporteur            |
| M. Alexander KONNOV     | Professeur des universités  | Lund University                       | Rapporteur            |
| M. KAORU MARUTA         | Professeur des universités  | Tohoku University                     | Examineur             |
| M. Bo SHU               | Docteur                     | Physikalisch-Technische Bundesanstalt | Examineur             |
| M. Fabian MAUSS         | Professeure des universités | Brandenburg University of Technology  | Examineur             |
| M. André Casal KULZER   | University of Stuttgart     | Invité                                |                       |

Mots-clés : Combustion, Ammoniac, Auto-inflammation, Moteur, MCR, Energie

#### Résumé :

Afin de réduire les émissions de gaz à effet de serre et de faire face à l'épuisement des ressources pétrolières, de nouveaux carburants sans carbone doivent être étudiés. Dans ce contexte, l'ammoniac et l'hydrogène apparaissent comme des candidats prometteurs pour l'alimentation des moteurs à allumage commandé. Cependant, ces deux carburants présentent des défis importants en matière de combustion. L'ammoniac doit être utilisé à des rapports de compression élevés afin d'améliorer le rendement et d'assurer sa viabilité économique. Pour compenser sa faible réactivité, il peut être mélangé avec de l'hydrogène. Toutefois, ces mélanges sont sujets au cliquetis, phénomène susceptible d'endommager le moteur. Il est donc essentiel d'en étudier et comprendre les mécanismes déclencheurs. Le présent travail contribue à la compréhension des processus d'auto-inflammation de l'ammoniac et des mélanges ammoniac-hydrogène. Dans un premier temps, des délais d'auto-inflammation ont été mesurés à l'aide d'une machine à compression rapide, caractérisée puis améliorée. Les expériences ont été menées dans des conditions de haute pression et température représentatives du cliquetis dans les moteurs à allumage commandé. Les résultats expérimentaux ont été comparés quantitativement aux prédictions de 38 mécanismes cinétiques afin d'identifier les mécanismes les plus adaptés. Des analyses cinétiques et de sensibilité ont ensuite été réalisées pour approfondir la compréhension de l'oxydation de l'ammoniac dans ces

conditions. Par la suite, l'ammoniac et les mélanges ammoniac–hydrogène ont été étudiés dans un moteur monocylindre à allumage commandé. Une méthodologie basée sur l'indice méthane a été développée, et les valeurs des mélanges ont été déterminées expérimentalement. Le cliquetis a ensuite été étudié en faisant varier la fraction d'hydrogène, ainsi que les conditions de fonctionnement du moteur comme la richesse, le taux de compression ou encore la forme du piston. Une nouvelle méthode d'estimation de la température des gaz frais est proposée, et son évolution au cours du cliquetis a été analysée. Enfin, à l'aide des résultats fondamentaux et expérimentaux obtenu au début de ce travail, une caractérisation cinétique du cliquetis en trois phases (initiation, pré-cliquetis et cliquetis) est proposée. Enfin, des simulations avec le code 1D DNS COGNAC ont été réalisées pour évaluer sa capacité à reproduire certaines caractéristiques physiques du cliquetis.

#### Summary:

To reduce greenhouse gas emissions and address the future challenge of oil depletion, new carbon-free fuels must be investigated. In this context, ammonia and hydrogen are promising candidates for fuelling spark-ignition engines. However, both fuels present significant combustion challenges. Ammonia must be used under high compression ratios to improve efficiency and ensure economic viability. To compensate for the low reactivity of ammonia, hydrogen can be blended with it. However, such mixtures are prone to knock, which can damage the engine. It is therefore essential to investigate and understand the mechanisms that trigger this phenomenon. The present work contributes to the understanding of the auto-ignition processes of ammonia and ammonia–hydrogen mixtures. First, ignition delay times for ammonia and ammonia–hydrogen blends were measured using a rapid compression machine, which was initially characterized and subsequently upgraded. Experiments were conducted under high-pressure and high-temperature conditions representative of knock-prone environments in spark-ignition engines. The experimental results were quantitatively compared with predictions from 38 kinetic mechanisms to identify the most suitable models. Kinetic and sensitivity analyses were then performed using these mechanisms to improve understanding of ammonia oxidation under severe conditions. Subsequently, ammonia and ammonia–hydrogen fuels were investigated in a single-cylinder spark-ignition engine. A methane number (MN) methodology was first developed, and the MN of ammonia–hydrogen blends was experimentally determined. Knock behaviour was studied by varying the hydrogen fraction in the fuel, as well as intake temperature and pressure, compression ratio, engine speed, equivalence ratio, and piston geometry. A new method for estimating end-gas temperature is proposed, and its evolution during knock was analysed. Finally, using one of the kinetic mechanisms identified earlier, combined with engine experiments, this work proposes a characterization of ammonia–hydrogen knock in three distinct phases: initiation, pre-knock, and knock. Additionally, simulations using the 1D DNS COGNAC code were performed to assess its ability to reproduce key physical characteristics of knock, such as oscillation amplitude as a function of cycle-to-cycle variability or knock development conditions.