

## Avis de Soutenance

Monsieur Hernando Maldonado Colmán

Soutiendra publiquement ses travaux de thèse intitulés

*Modeling soot formation in turbulent flames using a virtual chemistry approach*

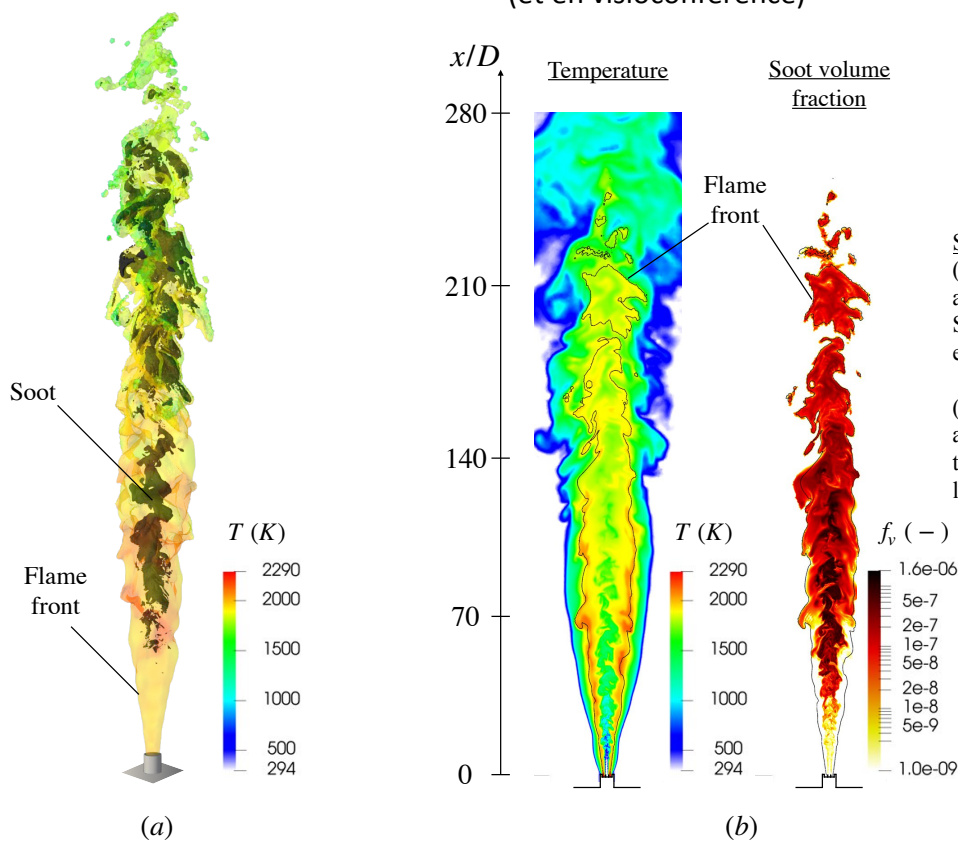
dirigés par Monsieur Benoît Fiorina et co-encadré par Monsieur Nasser Darabiha

Le **jeudi 27 mai 2021** à 14h00

A CentraleSupélec, 3 rue Joliot-Curie, 91192 Gif-sur-Yvette Cedex

Amphithéâtre Peugeot, sc.046, Bâtiment Bouygues

(et en visioconférence)



Sandia burner:

(a) Development of the flame front and colored by the temperature. Soot formation is given inside this envelope.

(b) 2-D fields of temperature (left) and soot volume fraction (right) in the  $x$ - $y$  plane. The black continuous line indicates the flame front.

## Composition du jury

Prof. Christian Hasse  
Prof. Guillaume Legros  
Prof. Daniel Haworth  
Dr. Eléonore Riber  
Dr. Olivier Colin  
Prof. Alberto Cuoci  
Prof. Nasser Darabiha  
Prof. Benoît Fiorina

TU Darmstadt  
Université D'Orléans  
Pennsylvania State University  
CERFACS  
IFP Energy Nouvelles  
Politecnico di Milano  
CentraleSupélec  
CentraleSupélec

Rapporteur  
Rapporteur  
Examineur  
Examinatrice  
Examineur  
Examineur  
Co-encadrant  
Directeur de thèse

**Titre :** Modélisation de la formation de suies dans des flammes turbulentes par une approche de chimie virtuelle

**Mots clés :** Modélisation de la cinétique, Suies, Transferts radiatifs, Flammes laminaires et turbulentes

**Résumé :** La modélisation de la formation de particules de suies est une tâche très difficile en raison des interactions multiples de plusieurs phénomènes physiques complexes. Les simulations numériques des flammes turbulentes produisant des suies impliquent le développement de modèles de suies élaborés souvent trop exigeants en termes de calcul. D'autre part, les modèles simplifiés de suies sont limités à une petite gamme de conditions de fonctionnement d'intérêt. Une approche globale optimisée et innovante, appelée chimie virtuelle, est proposée ici. Elle consiste en un formalisme mathématique comprenant des espèces virtuelles et des réactions virtuelles, dont les paramètres thermochimiques sont optimisés par un algorithme génétique, en utilisant une base de données d'apprentissage constituée d'éléments de flammes de référence. Elle permet alors de reproduire la structure des flammes hydrocarbures-air, ainsi que la prédiction d'espèces polluantes spécifiques définies par l'utilisateur, ici la fraction volumique de suies, pour de multiples régimes de combustion et conditions de fonctionnement. La chimie réduite finale consiste en 12 espèces virtuelles et 6 réactions virtuelles, ce qui réduit considérablement le temps de calcul par rapport aux modèles chimiques détaillés. Comme les pertes de chaleur radiative sont importantes dans les flammes de suies, un nouveau modèle virtuel radiatif est également développé pour en tenir compte. Des simulations de flammes éthylène-air laminaires 1-D et 2-D sont réalisées pour évaluer les modèles virtuels de suies et radiatifs. La température, la fraction volumique de suies et les pertes thermiques radiatives sont en bon accord avec les données de référence. Ensuite, les modèles virtuels développés sont mis à l'épreuve dans les simulations à grands échelles d'air (LES) de flammes turbulentes. Les temps caractéristiques liés à la combustion turbulente étant très courts comparés ceux de la formation des particules de suies, un nouveau modèle à l'échelle de la sous-maille est proposé ici pour gérer les termes filtrés de la source de suies dans un cadre de chimie virtuelle. Les nouveaux modèles de chimie virtuelle, radiatif et de sous-maille sont mis à l'épreuve dans une flamme turbulente 3-D éthylène-air non prémélangée. Les résultats sont validés avec des données expérimentales et des calculs de chimie détaillée.

**Title:** Modeling soot formation in turbulent flames using a virtual chemistry approach

**Keywords:** Kinetic Modeling, Soot, Radiative heat transfer, Laminar and Turbulent Flames

**Abstract:** Modeling soot particles formation is a very difficult task because of interactions of several complex physical phenomena. Numerical simulation of turbulent sooting flames implies development of elaborate soot models often too computationally demanding. Also, simplified soot models are limited to a small range of operating conditions of interest. Here, an innovative optimized global approach called virtual chemistry is proposed. It consists of a mathematical formalism including virtual species and virtual reactions, whose thermochemical parameters are optimized by a genetic algorithm using a learning database made of reference flame elements. This makes possible to reproduce the structure of hydrocarbon-air flames, as well as predicting specific user-defined pollutants, here soot volume fraction, for multiple combustion regimes and operating conditions. The final reduced chemistry consists of 12 virtual species and 6 virtual reactions, which considerably decreases the computational time compared to detailed chemistry models. As the radiative heat losses are important in sooting flames, a new radiative virtual model is also developed to account for them. Simulations of 1-D and 2-D laminar ethylene-air sooting flames are performed to evaluate the virtual soot and radiative models. Temperature, soot volume fraction and radiative heat losses are well predicted and are in good agreement with the reference data. Then, the developed virtual models are challenged in Large Eddy Simulations (LES) of turbulent sooting flames. As the turbulent combustion characteristic times are very small compared to those of soot particles production, a new subgrid-scale model is proposed here to manage the filtered soot source terms in a virtual chemistry framework. The new virtual chemistry, radiative and subgrid-scale models are challenged in a 3-D sooting turbulent non-premixed ethylene-air flame. Results are validated with experimental data and detailed chemistry computations.

