

Proposition de Thèse de Doctorat

Taux de dissipation scalaire et modèles d'indice de flamme pour la simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente multi-régimes

Encadrants: **Hernando Maldonado Colmán** (maldonah@ensma.fr)
Arnaud Mura (mura@ensma.fr)

Contexte général

Le développement de technologies énergétiques propres est d'une importance capitale pour réduire significativement les émissions nettes de carbone dans le domaine de la production d'électricité et de la propulsion. Un certain nombre de combustibles alternatifs tels que l'hydrogène, l'ammoniac ou les combustibles neutres en carbone (SAF, biocarburants) sont à l'étude pour atteindre cet objectif. Des travaux importants sont actuellement entrepris pour comprendre la combustion de ces carburants dans des scénarios d'écoulement turbulent complexe. Les modèles de combustion principalement conçus pour la combustion des hydrocarbures doivent donc être revisités et adaptés à ce type de carburants alternatifs. De ce point de vue, leur utilisation pratique conduit souvent une combustion multi-régime, c'est-à-dire que plusieurs modes de combustion coexistent : prémélangé, non prémélangé et partiellement prémélangé. Les écoulements multiphasiques ou les écoulements à forte recirculation conduisent généralement à ce type de combustion multi-régime. Une représentation trop imparfaite de celle-ci est susceptible d'impacter notablement l'estimation de l'efficacité de combustion ainsi que la formation de polluants, ce qui rend la conception de la chambre de combustion difficile et nécessite des efforts de modélisation supplémentaires.

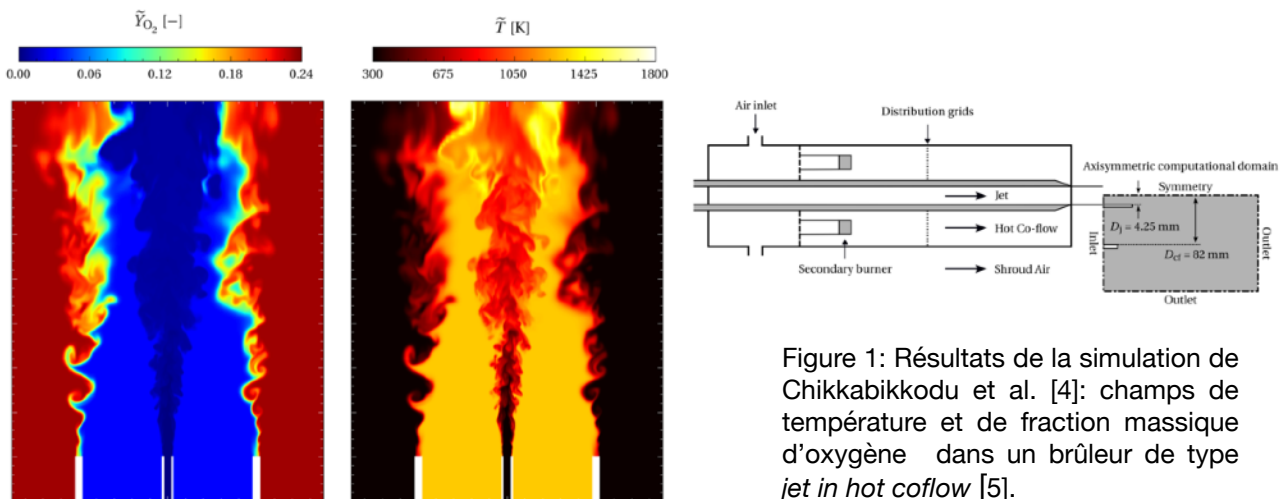


Figure 1: Résultats de la simulation de Chikkabikkodu et al. [4]: champs de température et de fraction massique d'oxygène dans un brûleur de type *jet in hot coflow* [5].

Description de la proposition

La modélisation de la combustion turbulente des mélanges imparfaits (i.e., en régimes partiellement prémélangés et non-prémélangés) est un sujet de recherche récurrent au sein de l'Institut Pprime [1–4] (voir Fig. 1). Dans ce type de conditions, deux variables sont a minima nécessaires pour décrire l'état thermochimique local du système partiellement prémélangé [6]. La

première est un scalaire passif, tel que la fraction de mélange, et la seconde rend compte du progrès de la réaction chimique ou des écarts à l'état d'équilibre chimique. Ainsi, différents modèles bidimensionnels, basés sur des *manifolds*, ont été proposés pour représenter la composition chimique [7–9] avec un coût de calcul réduit qui les rend particulièrement attractifs pour conduire des simulations de grandes dimensions. En régime turbulent, cela nécessite d'introduire des fermetures pour les taux de dissipation scalaire qui apparaissent dans les bilans de variance et de variance scalaire croisée [1]. Leur représentation doit permettre une description fine de la combustion turbulente partiellement prémélangée à l'aide de la simulation aux grandes échelles (LES). De plus, un indicateur approprié de la progression de la réaction est nécessaire pour capturer l'interchangeabilité entre les modes [3,10]. Dans le contexte de la combustion de l'hydrogène (ou de l'ammoniac), des défis supplémentaires sont identifiés puisque des propriétés diffusives différentes des espèces chimiques clés dans la région réactive de la flamme sont observées. Ces conditions difficiles motivent le développement de modèles rapides et précis pour LES de la combustion turbulente multi-régime.

Les objectifs de la thèse de doctorat sont : (i) l'étude des taux de dissipation scalaire des variables passives et réactives en combustion turbulente multi-régime à l'échelle du sous-filtre LES, y compris les effets de diffusion différentielle, (ii) la mise au point d'un modèle d'indice de régime de flamme. Le candidat au doctorat se concentrera sur la modélisation des écoulements turbulents réactifs basée sur la physique et les données, y compris la modélisation basée sur les *manifolds* [11] et les approches statistiques pour les interactions turbulence-chimie [12,13] en LES. Une mesure pratique de l'indice de flamme dynamique sera proposée, ce qui permettra de réaliser des LES à la fois précises et efficaces en termes de calcul, en particulier pour les applications industrielles. Le candidat mettra en œuvre des modèles et utilisera des outils de calcul de pointe pour conduire des simulations de pleine et de haute fidélité. De plus, le candidat au doctorat aura l'occasion d'interagir avec les expérimentateurs du laboratoire travaillant sur la combustion turbulente partiellement prémélangée de l'hydrogène, ce qui sera bénéfique pour la validation ultérieure des modèles.

References

- [1] A. Mura, V. Robin, M. Champion, Combust. Flame 149 (2007), 217–224
- [2] P. D. Nguyen, P. Bruel, S. Reichstadt, Flow Turbul. Combust. 82 (2009) 155–183
- [3] E. Illana, D. Mira, A. Mura, Combust. Theory Model. 25 (2021), 121–157
- [4] U. Chikkabikkodu, G. Boyer, F. Richard, A. Mura, Combust. Flame (2025) *Accepted*
- [5] B. B. Dally, A. N. Karpetis, R. S. Barlow, Proc. Combust. Inst. 161 (2002) 1147–1154.
- [6] P. A. Libby, F. A. Williams, Combust. Sci. Technol. 161 (2000) 351–390.
- [7] P. D. Nguyen, L. Vervisch, V. Subramanian, P. Domingo, Combust. Flame 157 (2010) , 43–61
- [8] E. Knudsen, Shashank, H. Pitsch, Combust. Flame 162 (2015) 159–180
- [9] M. E. Mueller, Combust. Flame 214 (2020) 287–305
- [10] A. G. Novoselov, B. A. Perry, M. E. Mueller, Combust. Flame 231 (2021), 111475
- [11] H. Maldonado Colmán, M. E. Mueller, Combust. Flame (2025) *Accepted*
- [12] H. Maldonado Colmán, A. Attili, M. E. Mueller, Combust. Flame 258 (2023) 112602
- [13] H. Maldonado Colmán, D. Veynante, N. Darabiha, B. Fiorina, Combust. Flame 247 (2023) 112496