

Avis de Soutenance

Monsieur Raghavendran RAMAN

Energétique

Soutiendra publiquement ses travaux de thèse intitulés

Rôle du transfert de chaleur radiatif dans les flammes d'ammoniac prémélangées

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

Unité de recherche : ICARE - Institut de Combustion, Aérothermique, Réactivité, Environnement

Soutenance prévue le **mercredi 11 juin 2025** à 10h00

Lieu : CNRS-ICARE, 1C avenue de la Recherche Scientifique, 45071 ORLEANS

Salle : de conférence

Composition du jury proposé

M. Fabien HALTER	Université d'Orléans	Directeur de thèse
M. Frédéric ANDRÉ	Université de Lille	Rapporteur
M. Joachim BEECKMANN	ITV RWTH Aachen University	Rapporteur
M. Guillaume LEGROS	Sorbonne University	Co-encadrant de thèse
M. Jean-Louis CONSALVI	IUSTI, Université d'Aix-Marseille	Co-directeur de thèse
Mme Céline MORIN	Université Polytechnique Hauts-de-France	Examinatrice
M. Stéphane ZALESKI	Sorbonne University	Invité

Mots-clés : simulation numérique, Ammoniac, flamme, réabsorption, flammes à expansion sphérique,

Résumé :

L'ammoniac peut faire partie de la conversation sur la décarbonation de la production d'énergie. Il est plus facile à manipuler et constitue l'un des produits chimiques les plus largement produits dans le monde, bénéficiant de décennies de connaissances industrielles accumulées, ce qui en fait une option attrayante. La combustion de NH_3 présente ses propres obstacles, tels que un faible taux de combustion, de faibles limites d'inflammabilité et de mauvaises performances des modèles cinétiques détaillés. Le NH_3 participe également au rayonnement, conduisant ainsi à un transfert de chaleur radiatif entre les gaz frais et la vapeur d'eau chaude. Par conséquent, cela doit également être pris en compte dans les modèles numériques. L'approximation optiquement mince conventionnellement utilisée n'est pas valide et nécessite une meilleure modélisation du rayonnement. Les flammes sphériques en expansion (SEF) sont une plateforme robuste pour étudier la dynamique des flammes de la pression sub-atmosphérique aux hautes pressions (50 atm), à la fois expérimentalement et numériquement. Les différents dispositifs expérimentaux, avec une référence particulière aux SEF, sont décrits dans le chapitre 2. Les SEF fournissent la vitesse de flamme des gaz brûlés (S_b), la longueur de Markstein (L_b), et la vitesse de combustion laminaire extrapolée S_L , une propriété fondamentale du combustible dans les états thermo-physiques prescrits. Le, L_b contrôle la dissipation et l'amplification des perturbations dans une flamme, contrôlant ainsi le régime de fonctionnement des chambres de combustion. À cette fin, diverses bases de données spectrales avec des résolutions allant de la bande étroite aux modèles de spectre complet, tels que WSGG et RC-FSK, ont été développées dans le chapitre 3. Les modèles spectraux ont été testés dans un cas découplé pour un ensemble de pressions et de configurations de flamme par rapport au modèle détaillé ligne par ligne (LBL). Une attention particulière a été accordée à la capture de la réabsorption du rayonnement thermique émis dans les gaz frais. Le SNBCK25, un modèle à large bande avec une résolution variable à travers le spectre, a été sélectionné en raison de la précision du modèle et du coût computationnel. Les modèles spectraux développés ont été résolus avec la méthode des ordonnées discrètes (DOM) ainsi qu'avec SNBCK25 pour les flammes SEF et les flammes planes se propageant librement dans le solveur open-source, FlameMaster. Les flammes SEF isobares, isochores, et planes ont été simulées pour un ensemble de conditions et de rapports d'équivalence sont décrits dans le chapitre 4. Dans les stades initiaux de la propagation de la flamme, DOM/SNBCK25 étaient proches du modèle OTM, et à mesure que la flamme se dilatait, les effets de la réabsorption devenaient cruciaux. Le comportement non monotone du L_b a été attribué au nombre de Zeldovich qui a été observé pour les flammes pauvres et stœchiométriques. La réabsorption accélère la transition du comportement non monotone. De plus, l'incapacité d'OTM à capturer la dynamique de la flamme a été notée dans plusieurs cas, avec une

référence particulière aux flammes riches NH₃-air à haute pression. Les effets de la teneur molaire en NH₃ sur DOM/SNBCK25 ont été évalués par rapport aux modèles adiabatiques (ADI), mettant en évidence le rôle direct des pressions partielles de NH₃ sur les processus radiatifs. Enfin, le flux de combustion massique des flammes NH₃-air à $\phi=1.0$ a été calculé pour mettre en évidence l'augmentation du taux de combustion massique avec la pression. Bien que le S_L diminue avec la pression, ceci est particulièrement intéressant car le glissement de NO et de NH₃ diminue avec la pression, ce dernier étant critique dans les flammes riches en NH₃.