THESIS DEFENSE

Optimized Virtual Chemistry: Simplifying Detailed Kinetics for Sustainable Combustion Modeling

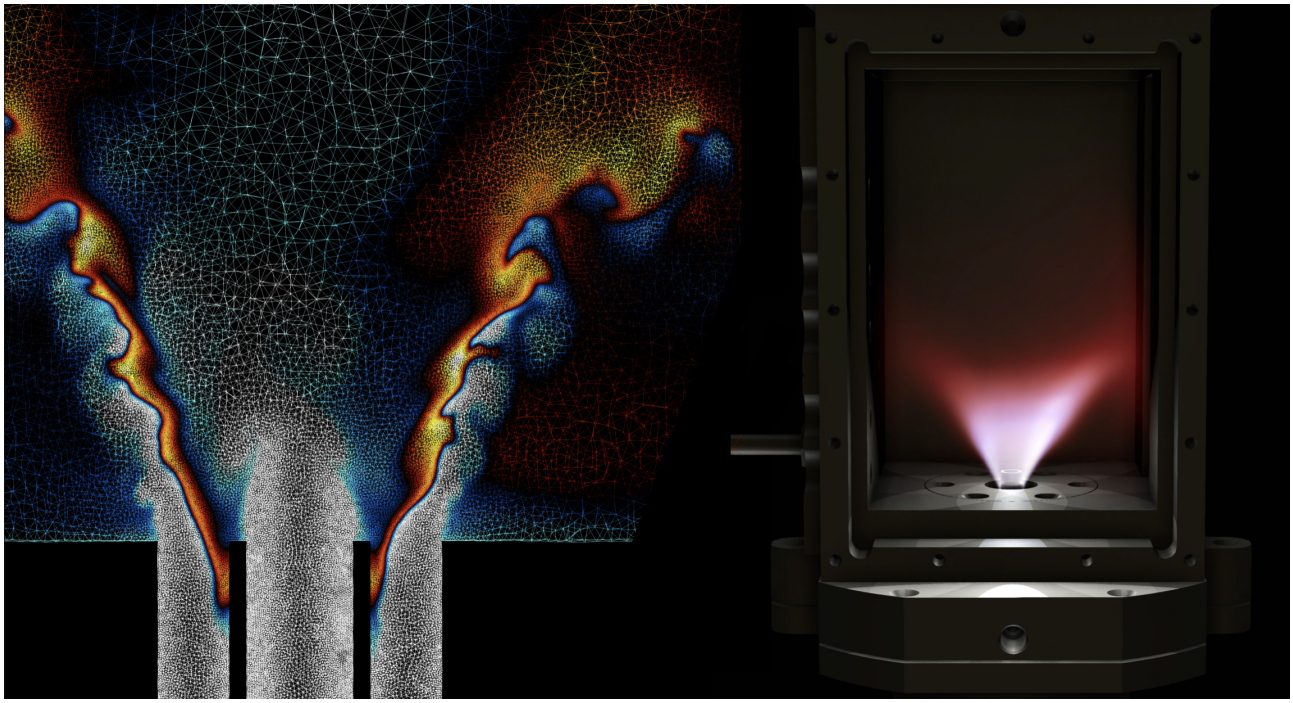
Matthieu Préteseille

DATE & TIME

Monday, 7 December 2026,
14:00 (UTC+1)

LOCATION

Théâtre Rousseau,
CentraleSupélec – Bâtiment Bouygues



Thesis Committee

Pierre BOIVIN	Research Director CNRS, M2P2, Marseille, France	Reviewer
Éléonore RIBER	Researcher, CERFACS, Toulouse, France	Reviewer
Pascale DESGROUX	Research Director CNRS, PC2A, Villeneuve-d'Ascq, France	Examiner
Tamás TURÁNYI	Professor, Eötvös Loránd University, Budapest, Hungary	Examiner
Alessandro PARENTE	Professor, Université Libre de Bruxelles, Belgium	Examiner
Benoît FIORINA	Professor, CentraleSupélec, Gif-sur-Yvette, France	Supervisor
Nasser DARABIHA	Emeritus professor, CentraleSupélec, Gif-sur-Yvette, France	Co-supervisor

Résumé

Chimie virtuelle optimisée : simplification de la cinétique détaillée pour la modélisation d'une combustion durable

Afin de développer des chambres de combustion plus propres et de réduire les émissions de CO_2 et d'espèces polluantes, les ingénieurs ont besoin d'outils de simulation numérique capables de prédire avec précision la structure des flammes, leur stabilisation et la formation de polluants, tout en maintenant un coût de calcul raisonnable pour l'étude de configurations industrielles. En pratique, la chimie des flammes est décrite par des schémas cinétiques détaillés particulièrement complexes pouvant comprendre plusieurs centaines d'espèces et plusieurs milliers de réactions chimiques élémentaires, rendant leur utilisation beaucoup trop coûteuse pour la modélisation haute-fidélité des flammes turbulentes de brûleurs industriels. Ainsi, le développement de modèles simplifiés décrivant la cinétique chimique des flammes est crucial, et de multiples méthodes de réduction ont été développées dans cet objectif. Bien qu'efficaces, ces méthodes imposent souvent des compromis entre précision, coût de calcul et facilité d'implémentation dans les solveurs de fluides réactifs. Parmi celles-ci, la méthode de chimie virtuelle s'est montrée particulièrement prometteuse en termes de compromis précision/coût de calcul. Elle repose sur la génération de schémas cinétiques ultra-réduits introduisant des espèces et des réactions virtuelles optimisées afin de reproduire certaines propriétés de référence des flammes laminaires. Néanmoins, les précédentes formulations reposaient sur des formalismes non standards, compliquant leur intégration dans les solveurs existants.

Cette thèse introduit un formalisme généralisé de chimie virtuelle préservant les principes fondamentaux de conservation des éléments et de la thermodynamique. Les espèces et réactions virtuelles sont décrites à l'aide de formulations thermodynamiques, cinétiques et de transport similaires à celles utilisées pour leurs homologues réelles, mais dont les paramètres sont optimisées. Les mécanismes ainsi construits adoptent une représentation compatible avec les formats standards de la chimie détaillée, permettant leur utilisation directe dans les outils de calcul des écoulements réactifs, sans recours à une tabulation préalable ni modification de code source. Une procédure d'optimisation systématique est proposée afin d'optimiser les mécanismes virtuels pour reproduire des propriétés de référence de flammes laminaires prédites par des modèles de chimie détaillée. La gamme de conditions opératoires ainsi que les propriétés étudiées sont choisies en fonction des applications visées. Cette démarche permet d'adapter la complexité du schéma aux propriétés pertinentes, plutôt que de rechercher une reproduction exhaustive de l'ensemble de la cinétique détaillée.

La méthode est d'abord validée sur des flammes laminaires d'hydrogène et de différents hydrocarbures dans des conditions variées de richesse et de composition. Elle est ensuite étendue à la modélisation d'espèces polluantes, avec une attention particulière portée sur le monoxyde de carbone (CO) dans les flammes d'hydrocarbures et les oxydes d'azote (NO_x) dans les flammes d'hydrogène. Enfin, les mécanismes virtuels sont appliqués à des configurations plus complexes et plus représentatives des conditions opératoires des chambres de combustion industrielles, comprenant des flammes gazeuses turbulentes et des flammes diphasiques avec injection de carburant liquide en spray. Les résultats illustrent la capacité de ces schémas virtuels à décrire, à coût très réduit, les dynamiques de flammes et émissions polluantes de référence dans des conditions opératoires distinctes de celles considérées lors de leur optimisation sur des flammes laminaires.

En associant une forte réduction de la complexité chimique, une précision ciblée sur les propriétés d'intérêt et une compatibilité directe avec les solveurs existants, cette thèse établit les bases d'un formalisme de chimie virtuelle généralisé et standardisé. Celui-ci ouvre une nouvelle voie vers des simulations haute fidélité d'écoulements réactifs complexes à moindre coût, tant pour la recherche académique que pour les applications industrielles en combustion.

Mots-clés : Chimie virtuelle; Combustion; Optimisation; Flammes; Schéma cinétique; Modélisation.

Abstract

Optimized Virtual Chemistry: Simplifying Detailed Kinetics for Sustainable Combustion Modeling

Developing cleaner combustion chambers and reducing CO_2 and pollutant emissions require numerical simulation tools capable of accurately predicting flame structures, stabilization mechanisms, and pollutant formation, while maintaining affordable computational costs for industrial applications. In practice, flame chemistry is described by highly complex detailed kinetic mechanisms, potentially involving several hundred species and thousands of elementary chemical reactions, making their use prohibitively expensive for high-fidelity simulations of turbulent flames in industrial burners. Developing simplified models of flame chemistry is therefore essential, and numerous chemical reduction methods have been proposed for this purpose. Although effective, these approaches often involve compromises between accuracy, computational cost, and ease of implementation in reactive flow solvers. Among them, virtual chemistry has emerged as a particularly promising approach in terms of the accuracy/computational cost compromise. It relies on the generation of highly-reduced kinetic mechanisms introducing optimized virtual species and reactions to reproduce selected reference properties of laminar flames. However, previous formulations relied on non-standard descriptions, complicating their integration into existing solvers.

This thesis introduces a generalized virtual chemistry framework that preserves the fundamental principles of elemental conservation and thermodynamics. Virtual species and reactions are described using standard thermodynamic, kinetic, and transport formulations, similar to those of their real counterparts, but with optimized parameters. The resulting mechanisms are compatible with standard detailed chemistry formats, allowing their direct integration into existing reactive flow solvers without requiring tabulation or source-code modifications. A systematic optimization procedure is developed to generate virtual mechanisms capable of reproducing reference laminar flame properties predicted by detailed chemistry. The range of operating conditions and the targeted flame properties are selected according to the intended applications. This approach allows the complexity of the virtual mechanisms to be tailored to the properties of interest, rather than attempting to reproduce the entire detailed chemical kinetics.

The methodology is first validated on laminar hydrogen and hydrocarbon flames over a range of equivalence ratios and mixture compositions. It is then extended to pollutants, with particular emphasis on carbon monoxide (CO) formation in hydrocarbon flames and nitrogen oxides (NO_x) in hydrogen flames. Finally, the virtual mechanisms are applied to more complex configurations representative of industrial combustion chambers, including turbulent gaseous flames and spray flames with liquid fuel injections. The results demonstrate the ability of these virtual mechanisms to reproduce reference flame dynamics and pollutant emissions at substantially reduced computational costs, under operating conditions distinct from the laminar flame configurations used during optimization.

By combining a substantial reduction in chemical complexity, targeted predictive accuracy, and straightforward compatibility with existing solvers, this thesis establishes the foundations of a generalized and standardized virtual chemistry framework. This approach opens new perspectives for affordable high-fidelity simulations of complex reactive flows, supporting both academic research and industrial combustion applications.

Keywords: Virtual chemistry; Combustion; Optimization; Flames; Kinetic mechanism; Modeling.