

## Avis de Soutenance

Monsieur Nicolas Dumont

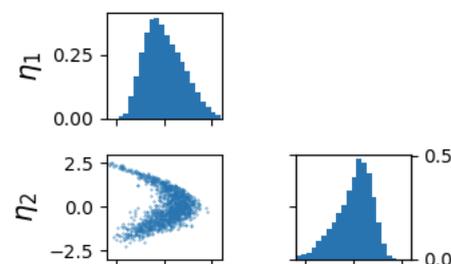
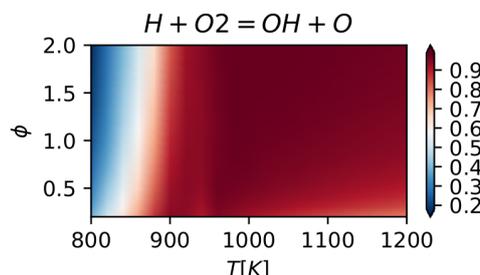
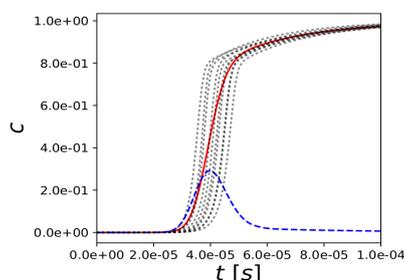
Soutiendra publiquement ses travaux de thèse intitulés

# Méthodes numériques et modèle réduit de chimie tabulée pour la propagation d'incertitudes de cinétique chimique

dirigés par Monsieur Olivier Gicquel

Soutenance prévue le **lundi 8 juillet** à 13h00

Lieu : CentraleSupélec, 3 rue Joliot-Curie, 91192 Gif-sur-Yvette Cedex  
Amphithéâtre I (Bâtiment Eiffel)



A gauche : Trajectoires, profil moyen et profil d'écart-type de la variable d'avancement dans le cas d'une cinétique chimique incertaine. Au milieu : Indice de Sobol pour le délai d'auto-allumage de la réaction  $H+O_2=OH+O$  en fonction de la température et de la richesse. A droite : Histogrammes et nuages de points de réalisations jointes des deux premières variables aléatoires obtenues par l'expansion de Karhunen-Loève du terme source de la variable d'avancement.

## Composition du jury

Mme DOMINGO Pascale  
M. PARENTE Alessandro  
M. GIOVANGIGLI Vincent  
M. LE MAITRE Olivier  
Mme ROCHOUX Mélanie  
M. VANHOVE Guillaume  
M. GICQUEL Olivier  
M. VICQUELIN Ronan

Directeur de Recherche, CORIA-CNRS  
Professeur à l'Université Libre de Bruxelles  
Directeur de Recherche, CMAP-CNRS  
Directeur de Recherche, LIMSI-CNRS  
Chercheur senior, CERFACS  
Maître de Conférences à l'Université de Lille, PC2A-CNRS  
Professeur à CentraleSupélec, EM2C-CNRS  
Maître de Conférences à CentraleSupélec, EM2C-CNRS

Rapporteur  
Rapporteur  
Examinateur  
Examinateur  
Examinatrice  
Examinateur  
Directeur de thèse  
Co-Encadrant

## Titre : Méthodes numériques et modèle réduit de chimie tabulée pour la propagation d'incertitudes de cinétique chimique

**Mots clés :** Propagation d'incertitudes, Combustion, Chimie tabulée

**Résumé :** La simulation numérique joue aujourd'hui un rôle majeur dans le domaine de la combustion, que ce soit au niveau de la recherche en offrant la possibilité de mieux comprendre les phénomènes ayant lieu au sein des écoulements réactifs ou au niveau du développement de nouveaux systèmes industriels par une diminution des coûts liés à la conception de ces systèmes. A l'heure actuelle, la simulation aux grandes échelles est l'outil le mieux adapté à la simulation numérique d'écoulements réactifs turbulents. Cette simulation aux grandes échelles d'écoulements réactifs n'est en pratique possible que grâce à une modélisation des différents phénomènes :

- la turbulence est modélisée pour les plus petites structures permettant de n'avoir à résoudre que les plus grandes structures de l'écoulement et ainsi réduire le coût de calcul
- la chimie des différentes espèces réactives est modélisée à l'aide de méthodes de réduction permettant de considérablement réduire le coût de calcul

La maturité de la simulation aux grandes échelles d'écoulements réactifs en fait aujourd'hui un outil fiable, prédictif et prometteur. Il fait désormais sens de s'intéresser à l'impact des paramètres impliqués dans les différents modèles sur le résultat de la simulation. Cette étude de l'impact des paramètres de modélisation peut être vue sous l'angle de la propagation d'incertitudes, et peut donner des informations intéressantes à la fois d'un côté pratique pour la conception robuste de systèmes mais également d'un côté théorique afin d'améliorer les modèles utilisés et d'orienter les mesures expérimentales à réaliser afin d'améliorer la fiabilité de ces modèles.

Le contexte de cette thèse est le développement de méthodes efficaces permettant la propagation d'incertitudes présentes dans les paramètres de cinétique chimique des mécanismes réactionnels au sein de simulation aux grandes échelles, ces méthodes devant être non intrusives afin de profiter de

l'existence des différents codes de calcul qui sont des outils nécessitant de lourds moyens pour leur développement. Une telle propagation d'incertitude à l'aide d'une méthode de force brute souffre du "fléau de la dimension" du fait du grand nombre de paramètres de cinétique chimique, impliquant une impossibilité pratique avec les moyens de calculs actuels et justifiant le développement de méthodes efficaces.

L'objectif de la thèse est donc le développement d'un modèle réduit utilisable pour la propagation d'incertitudes dans la simulation aux grandes échelles. La prise en main et l'implémentation de différents outils issus de la propagation d'incertitudes a été un travail préliminaire indispensable dans cette thèse afin d'amener ces connaissances et compétences au sein du laboratoire EM2C.

La méthode développée dans cette thèse pour la propagation d'incertitudes des paramètres de cinétique chimique se restreint aux cas d'une modélisation de la chimie dans laquelle l'avancement du processus de combustion est résumé par l'évolution d'une variable d'avancement donnée par une équation de transport, l'accès aux autres informations se faisant grâce à l'utilisation d'une table. Au travers de l'étude de l'évolution d'un réacteur adiabatique à pression constante contenant un mélange homogène d'air et de dihydrogène, il est montré qu'une grande partie des incertitudes d'un tel système peuvent être expliquées grâce aux incertitudes de la variable d'avancement. Cela permet de définir une table chimique utilisable pour la propagation d'incertitudes des paramètres de cinétique chimique dans les simulations aux grandes échelles. L'introduction des incertitudes se fait alors uniquement par la modélisation du terme source présent dans l'équation de transport de la variable d'avancement, lequel peut être paramétré à l'aide de quelques paramètres incertains évitant ainsi le "fléau de la dimension".

## Title: Numerical methods reduced model of tabulated chemistry and for uncertainties propagation of chemical kinetic

**Keywords:** Uncertainty propagation, Combustion, Tabulated chemistry

**Abstract:** Numerical simulation plays a key role in the field of combustion today, either in the research area by permitting a better understanding of phenomena taking place inside reactive flows or in the development of industrial application by reducing designing cost of systems. Large Eddy Simulation is at the time the most suited tool for the simulation of reactive flows. Large Eddy Simulation of reactive flows is in practice only possible thanks to a modeling of different phenomena:

- turbulence is modeled for small structures allowing to resolve only big structures which results in lower computational cost
- chemistry is modeled using reduction methods which allows to drastically reduce computational cost

The maturity of Large Eddy Simulation of reactive flows makes it today a reliable, predictive and promising tool. It now makes sense to focus on the impact of the parameters involved in the different models on the simulation results. This study of the impact of the modeling parameters can be seen from the perspective of uncertainties propagation, and can give interesting informations both from a practical side for the robust design of systems but also on the theoretical side in order to improve the models used and guide the experimental measurements to be made for the reliability improvement of these models.

The context of this thesis is the development of efficient methods allowing the propagation of uncertainties present in the chemical kinetic parameters of the reaction mechanisms within Large Eddy Simulation, these methods having to be non-intrusive in order to take advantage of the existence of the different computation codes which are tools requiring heavy means for their

development. Such a propagation of uncertainties using a brute-force method suffers from the "curse of dimensionality" because of the large number of chemical kinetic parameters, implying a practical impossibility with the current means of computation which justifies the development of efficient methods.

The objective of the thesis is the development of a reduced model that can be used for uncertainties propagation in Large Eddy simulations. The handling and implementation of various tools resulting from the uncertainties propagation framework has been an essential preliminary work in this thesis in order to bring this knowledge and skills into the EM2C laboratory.

The method developed in this thesis for the propagation of chemical kinetic parameters uncertainties is limited to chemistry models in which the advancement of the combustion process is summarized by the evolution of a progress variable given by a transport equation, the access to other informations being made through the use of a table. Through the study of the evolution of a constant pressure adiabatic reactor containing a homogeneous mixture of air and dihydrogen, it is shown that a large part of the uncertainties of such a system can be explained by the uncertainties of the progress variable. This makes it possible to define a chemical table that can be used to propagate uncertainties of chemical kinetic parameters in Large Eddy Simulations. The introduction of the uncertainties is then done only by the modeling of the source term present in the transport equation of the progress variable, which can be parameterized with the help of few uncertain parameters thus avoiding the "curse of dimensionality".

