

## Avis de Soutenance

### Artur Carvalho Santos

soutiendra publiquement ses travaux de thèse intitulés

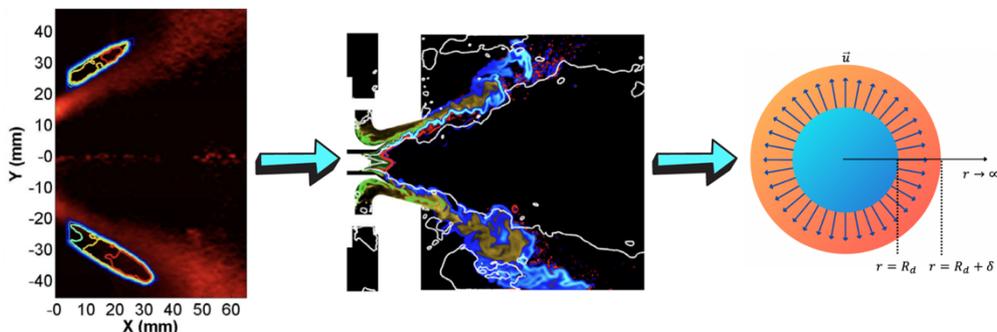
***On the modelling of heat and mass transfer for multi-component droplets***

***Modélisation des transferts de chaleur et masse pour des gouttes de carburant multi-composants***

dirigés par **Monsieur Aymeric Vié**

**Le Vendredi 2 Décembre à 14h00**

à CentraleSupélec, 3 rue Joliot-Curie, 91192 Gif-sur-Yvette Cedex  
Théâtre Rousseau (Bâtiment Bouygues)



$$\frac{dX_i}{d\xi} = \frac{1}{4\pi c} \left( \left[ -\sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N \frac{\dot{n}_k}{\bar{D}_{i,k}} \right] X_i + \left[ \dot{n}_i \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N \frac{X_k}{\bar{D}_{i,k}} \right] \right)$$

$$\sum_{k=1}^N \dot{m}_k h_{s,k} - 4\pi r^2 \lambda \frac{dT}{dr} = \dot{Q}$$

$$\mathbf{x}^s = \exp \left[ \frac{1}{R_d} \mathcal{A} \right] \mathbf{c},$$

$$\mathbf{x}^\infty = \exp \left[ \frac{Sh_{min}^* - 2}{Sh_{min}^* R_d} \mathcal{A} \right] \mathbf{c}.$$

$$\sum_{k=1}^N \dot{m}_k c_{p,k} = 4\pi R_d \left[ \frac{Nu^*}{2} \right] \lambda \ln|1 + B_T|$$

*Experimental and numerical studies for combustion chamber with liquid fuel injected via spray.  
Integration step for low-dimensional evaporation models. Images extracted from [1],[2]*

### Composition du jury

**Bénédicte Cuenot**

**Sergei Sazhin**

**Christophe Duwig**

**Chaouki Habchi**

**Fernando L. Sacomano F.**

**Aymeric Vié**

Chercheur Senior, CERFACS

Professeur, University of Brighton

Professeur, KTH Royal Institute of Technology

Ingénieur de Recherche, IFP Énergies Nouvelles

Maître de Conférences, Universidade de São Paulo

Maître de Conférences, CentraleSupélec, U. Paris-Saclay

Rapporteur

Rapporteur

Examinateur

Examinateur

Examinateur

Directeur de thèse

[1] A. Renaud, S. Ducruix, P. Scoufflaire, L. Zimmer, *Flame shape transition in a swirl stabilised liquid fueled burner*, Proc. Combust. Institute, 2015.

[2] L. C. C. Mesquita, A. Vié, L. Zimmer, S. Ducruix, *Numerical analysis of a flame shape bifurcation in a two-stage swirled liquid burner using Large Eddy Simulation*, Proc. Combust. Institute, 2021.

**Title :** On the modelling of heat and mass transfer for multi-component droplets

**Keywords :** Evaporation, Combustion, Multi-Component, Phase-Change, Spray

**Abstract :** Currently, Computational Fluid Dynamics (CFD) solvers are important tools to help design combustion chambers. To account for a wide range of physical phenomena including turbulence, combustion and liquid fuel injection for instance, modelling approaches have been proposed in the literature. Focusing on the fuel injection, the objective is to atomize the liquid fuel as fast as possible to generate a spray, i.e. a collection of small droplets, which will vaporize and thus feed the combustion. The vaporization step is very important for the simulation chain, as it will determine the fuel availability for combustion.

To model vaporization, low-dimensional models have been proposed in the literature. Among them, the most famous is the one of Abramzon and Sirignano (1989), widely used within the combustion community. This single-component model has been validated against many experiments, but still many elements can be improved with today's literature. Furthermore, due to the rise of biofuels as a solution for decarbonated combustion, there is a strong demand on the precise characterization of their combustion, for which the composition varies from conventional fuels. In this way, multi-component evaporation models are required. Unfortunately, there is still no consensus for best strategies in this multi-component scenario. A first objective is thus to survey the existing strategies, highlighting possible weaknesses while proposing new improvements. To achieve this goal, the different derivation steps of evaporation models are presented. Core simplifying hypotheses are stated, and baseline expressions are obtained to form a theoretical basis. Then, required closures are listed for mass diffusion and the vapor-liquid equilibrium. A first goal is to summarize the building blocks for the construction of droplet models, and the resulting framework is used to derive all droplet phase-change models studied in this work.

A second part of this study is devoted to single-component models. Historical contributions are stated and derived, with corrections to take Stefan flow effects into account detailed. Then, the incorporation of convective effects is studied through the use of boundary layer theory and the Abramzon-Sirignano (A-S) model is thus derived. To account for convective effects, a literature review is presented for correlations of drag coefficients and Nusselt/Sherwood numbers. A numerical investigation is then carried out using the A-S model by varying correlations specific to convection. An outlook is thus provided for deviations of results within up-to-date correlations, encouraging new developments and validation strategies. Finally, the bulk of the work is oriented to tackle the multi-component modelling, focusing on discrete component models. A mass transfer model based on the Stefan-Maxwell equations is developed to serve as a reference, with the addition of an uncoupled, novel energy formulation that does not explicitly depend on the mass diffusion closure. Then, the main multi-component models of the literature are presented and are extended to account for all phase-change scenarios with no limitations in number of species. A thorough study for the characterization of diffusion coefficients is also performed. Finally, all extended models are compared in various cases relevant for combustion applications, showing their forces and weaknesses and thus opening new perspectives for multi-component droplet phase-change modelling.

**Titre :** Modélisation des transferts de chaleur et masse pour des gouttes de carburant multi-composants

**Mots clés :** Évaporation, Combustion, Multi-Composant, Changement de Phase, Spray

**Résumé :** Les outils de simulation numérique en mécanique des fluides sont des outils importants pour la conception de chambres de combustion. Pour pouvoir prendre en compte une vaste gamme de phénomènes physiques y compris la turbulence, par exemple la combustion et l'injection de carburant liquide, des modèles ont été proposés. Si on se concentre sur l'injection liquide, l'objectif est d'atomiser le carburant liquide le plus rapidement possible de sorte à générer un spray, c'est-à-dire un ensemble de gouttelettes qui se vaporiseront pour finalement alimenter la combustion. L'étape de vaporisation s'avère ainsi très importante pour la chaîne de simulation, étant donné qu'elle déterminera la disponibilité de carburant pour la combustion.

Pour modéliser la vaporisation, des modèles bas-ordre ont été développés par la littérature, parmi lesquels le plus célèbre est celui de Abramzon et Sirignano (1989), fréquemment employé dans la communauté de combustion. Ce modèle à carburant mono-composant a été validé contre plusieurs études expérimentales, mais plusieurs éléments peuvent toujours être améliorés avec la littérature contemporaine. De plus, avec l'utilisation des biocarburants en tant que solution pour la combustion décarbonisée, il existe une grande demande pour la caractérisation précise de leur combustion, étant donné que leur composition varie par rapport aux carburants conventionnels. Ainsi, des modèles d'évaporation pour des carburants multi-composants sont requis. En revanche, il n'y a toujours pas de consensus pour une meilleure stratégie dans ce scénario multi-composant. Un premier objectif est ainsi de comprendre les stratégies existantes, en soulignant des potentielles faiblesses pour pouvoir proposer des améliorations. Pour y arriver, les différentes étapes de dérivation pour des modèles d'évaporation sont présentées. Les hypothèses simplificatrices fondamentales sont établies, conduisant à des expressions élémentaires qui posent ainsi une base théorique. Ensuite, les fermetures requises pour la diffusion massique et l'équilibre vapeur-liquide sont développées. Cette première partie vise à rassembler tous les modules principaux qui conduisent à la construction de modèles de changement de phase pour des gouttes, et le cadre qui s'en produit sera utilisé pour la dérivation de tous les modèles contenus dans ce manuscrit. Une deuxième partie est consacrée aux modèles mono-composant. Les contributions historiques sont établies et dérivées, avec les corrections pour prendre en compte l'écoulement de Stefan. Par la suite, l'incorporation des effets convectifs est étudiée avec l'emploi de la théorie de couche limite et le modèle d'Abramzon-Sirignano (A-S) en suit. Une recherche numérique est ensuite menée en utilisant le modèle A-S en variant les corrélations spécifiques aux effets convectifs. Une perspective est ainsi offerte pour les déviations parmi des corrélations fréquemment utilisées.

La principale composante de ce travail est finalement la modélisation multi-composant, en se concentrant sur les modèles à composants discrets. Un modèle qui servira de référence basée sur la résolution des équations de Stefan-Maxwell est développé, couplé avec une nouvelle formulation pour l'énergie indépendante de la fermeture de diffusion massique. Ensuite, les principaux modèles multi-composant de la littérature sont présentés, avec des propositions pour leur extension contemplant des situations plus générales de changement de phase. Une étude complète est aussi menée pour la caractérisation des coefficients de diffusion. Tous les modèles étendus sont ainsi comparés dans des cas représentatifs pour des applications de combustion, afin de montrer leurs avantages et faiblesses et ainsi ouvrir des nouvelles perspectives pour la modélisation de changement de phase pour des gouttes multi-composant.