

DOCTORAT DE L'UNIVERSITE DE LILLE 1 SCIENCES ET TECHNOLOGIES**N° d'ordre : 42520****NOM/PRENOM DU CANDIDAT : KEITA MAMADY**

Ecole doctorale : SMRE (Science de la Matière, du Rayonnement et de l'Environnement)

Laboratoire : PC2A (Physico-Chimie des Processus de Combustion et de l'Atmosphère)

Discipline : Chimie théorique, physique, analytique

Si cotutelle, établissement partenaire :

JURY :

- Directeur(s) de thèse : Abderrahman El BAKALI
- Rapporteurs : Alexander KONNOV, Guillaume DAYMA
- Examineurs : Benedetta FRANZELLI, Pascale DESGROUX, Olivier COLIN

SOUTENANCE : 14 Décembre 2017 à 14h00, Amphi 6 du C15, Université de Lille 1**TITRE DE LA THESE :**

MODELISATION DE LA FORMATION DES PARTICULES DE SUIES ISSUES DES PROCEDES DE COMBUSTION

RESUME :

Pour mieux contrôler l'émission des particules de suies et minimiser leurs impacts sur l'environnement et la santé publique, il est crucial de mieux comprendre leurs mécanismes de formation, en particulier dans les processus de combustion des hydrocarbures. La première étape de formation de ces matières carbonées est la formation de leurs précurseurs appelés HAP (Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques), suivie de l'étape de nucléation des suies. La première partie de ce travail de recherche est focalisée sur le développement d'un nouveau schéma cinétique détaillé, décrivant avec précision non seulement l'auto-inflammation et la combustion basse et haute températures des carburants liquides de transport et ceux du laboratoire, mais aussi la formation des HAP jusqu'au coronène car ces HAP sont suspectés d'être les principaux précurseurs de suies.

Dans la deuxième partie de ce travail, un modèle sectionnel de suies est utilisé avec le présent schéma cinétique afin d'investiguer les mécanismes de formation des particules de suies en reproduisant les tendances des données expérimentales (fractions volumiques de suies, diamètres des particules). Ce modèle de suies décrit la nucléation, la condensation, la croissance en surface, la coagulation et l'oxydation des particules de suies. Le couple "schéma cinétique-modèle sectionnel de suies" a été validé sur les flammes prémélangées laminaires de méthane, d'éthylène et de n-butane à différentes richesses. Les dimérisations homomoléculaire et hétéromoléculaire des HAP de taille modérée (du pyrène au coronène) ont été considérées pour la modélisation de la nucléation des particules de suies.

Mots clés: Suies, Nucléation, Schéma Cinétique, HAP, Modélisation, Méthode Sectionnelle, Flammes

DOCTORAT DE L'UNIVERSITE DE LILLE 1 SCIENCES ET TECHNOLOGIES**N° order : 42520****NAME/SURNAME OF THE CANDIDATE : KEITA MAMADY**

Doctoral School : SMRE (Science de la Matière, du Rayonnement et de l'Environnement)

Laboratory : PC2A (Physico-Chimie des Processus de Combustion et de l'Atmosphère)

Discipline : Chimie théorique, physique, analytique

In case of co-tutorial thesis, provide the partner institution :

THESIS COMMITTEE :

- Thesis supervisor(s) : Abderrahman El BAKALI
- Referees : Alexander KONNOV, Guillaume DAYMA
- Examiners : Benedetta FRANZELLI, Pascale DESGROUX, Olivier COLIN

DEFENSE : December 14, 2017 at 14h00, Amphi 6 du C15, Université de Lille 1**TITLE OF THE THESIS :**

MODELING OF SOOT PARTICLES NUCLEATION FROM COMBUSTION PROCESSES

ABSTRACT :

To better control soot particles emission and minimize their health and environmental effects, it is crucial to better understand their formation mechanisms in particularly combustion processes. The first step of these particulates matter formation is their precursors PAH (Polycyclic Aromatic Hydrocarbons) formation, followed by the nucleation process which links the gas-phase (PAH chemistry) and solid-phase (particles). In the first part of this work, we developed a new detailed chemical kinetic mechanism describing accurately both low and high-temperature ignition and combustion of a wide range of liquid transportation and laboratory fuels as well as the formation of PAH up to coronene, suspected to be major soot precursors.

In the second part of this work, a sectional soot model is used with the developed kinetic mechanism in order to investigate soot particles nucleation mechanisms in reproducing experimental data tendencies (soot volume fractions and particles diameters). This couple of kinetic and soot models is run on the detailed kinetic solver Cantera in order to solve both the gas and disperse solid phases in steady laminar flame conditions. The soot model used with the developed detailed kinetic mechanism is validated over premixed laminar methane, ethylene and n-butane flames at various equivalence ratios. Homomolecular and Heteromolecular dimerizations of modest size of PAHs from pyrene to coronene (mass of monomer ranging from 200 to 300 amu) have been considered for particle nucleation modeling.

Keywords: Soot, Nucleation, Kinetic Mechanism, PAH, Modeling, Sectional Method, Flames