

Sujet de thèse, démarrage septembre 2015.

MODELISATION DE CHIMIE COMPLEXE DANS UN CODE MONTE CARLO POUR L'EQUATION DE BOLTZMANN

Proposé par AIRBUS DEFENCE AND SPACE,
En collaboration avec
L'UNIVERSITE DE VERSAILLES-SAINT-QUENTIN-EN-YVELINES ET L'UNIVERSITE DE ROUEN.

Contacts : Laurent Dumas (laurent.dumas@uvsq.fr)
Arnaud Bultel (arnaud.bultel@coria.fr)
Maximilien Dramont (maximilien.dramont@astrium.eads.net)

Contexte

Les méthodes DSMC (Direct Simulation Monte Carlo) sont utilisées par AIRBUS Defence and Space depuis la fin des années 80 pour traiter les écoulements hypersoniques en milieu raréfié. Les applications récurrentes consistent à calculer les torseurs d'efforts aérodynamiques et flux thermiques pariétaux s'exerçant sur les engins spatiaux, ainsi qu'à calculer les écoulements de jets (propulsifs ou de contrôle d'attitude) qui éclatent fortement dans le vide. Les nouveaux développements d'AIRBUS D&S, notamment les rentrées d'étages de lanceurs en mission GTO, font apparaître un besoin d'applications plus fines en termes de modélisation. En effet, les énergies mises en jeu sont telles que la prise en compte des réactions chimiques et des phénomènes de rayonnement des gaz sont nécessaires, notamment pour une détermination plus réaliste des flux thermiques. La simulation couplée des écoulements et des phénomènes radiatifs étant très ambitieuse à ce stade, la première étape - et objet de cette proposition de thèse - est de développer l'outil de calcul DSMC de manière à pouvoir prendre en compte les écoulements réactifs.

Cette recherche fait l'objet d'une collaboration entre AIRBUS D&S, le laboratoire de Mathématiques de l'Université de Versailles-Saint-Quentin-en-Yvelines, et le CORIA de l'Université de Rouen.

Objectifs de la thèse

Ces travaux associent la thermodynamique des gaz réactifs à la méthode DSMC des écoulements raréfiés. Plusieurs approches et types de modélisations sont répertoriés dans la littérature, et il conviendra d'en faire au préalable l'étude comparative. Il s'agira également de s'intéresser tout particulièrement aux spécificités de la méthode DSMC (algorithme, approche statistique) et des contraintes qu'induisent l'intégration de la chimie et du rayonnement. Plusieurs points sont déjà identifiés tels que la qualité statistique des échantillons de molécules issues de réactions chimiques à faible taux de production, les problématiques liées à la disparité des échelles de temps, et la modélisation de l'énergie interne associée à la modélisation du rayonnement. En outre, il conviendra également de s'intéresser tout particulièrement à l'optimisation des algorithmes et à l'implémentation informatique, les besoins de puissance informatique des calculs DSMC étant extrêmement élevés.

Les principales étapes de la thèse identifiées sont :

- Prise en main du code AIRBUS D&S et familiarisation aux méthodes DSMC.
- Étude bibliographique des différentes approches existantes pour la modélisation de la chimie en DSMC et étude comparative des différentes possibilités de modélisation.
- Prise en compte des contraintes de la modélisation du rayonnement sur les processus de collisions et la modélisation de l'énergie interne.
- Étude de sensibilité des simulations aux choix de discrétisation temporelle et de représentativité des échantillons microscopiques simulés.
- Codage et optimisation algorithmique des modèles choisis, vis-à-vis du parallélisme et de l'efficacité informatique
- Validation sur des cas pratiques de calcul

Compétences souhaitées

Le sujet demande de bonnes connaissances en mathématiques (équation de Boltzmann, probabilités) et en chimie (gaz réactifs).

Le lieu d'inscription est l'école doctorale de l'Université Paris Saclay (EDMH). La thèse se déroulera principalement sur le site d'Airbus D&S (Les Mureaux). Pour toute candidature, joindre CV, lettre de motivation et relevé de notes de Master.