

Perfectionnement d'un code 3D de simulation de décharge couronne pointe-plan dans l'air et comparaison avec l'expérience

Contact :

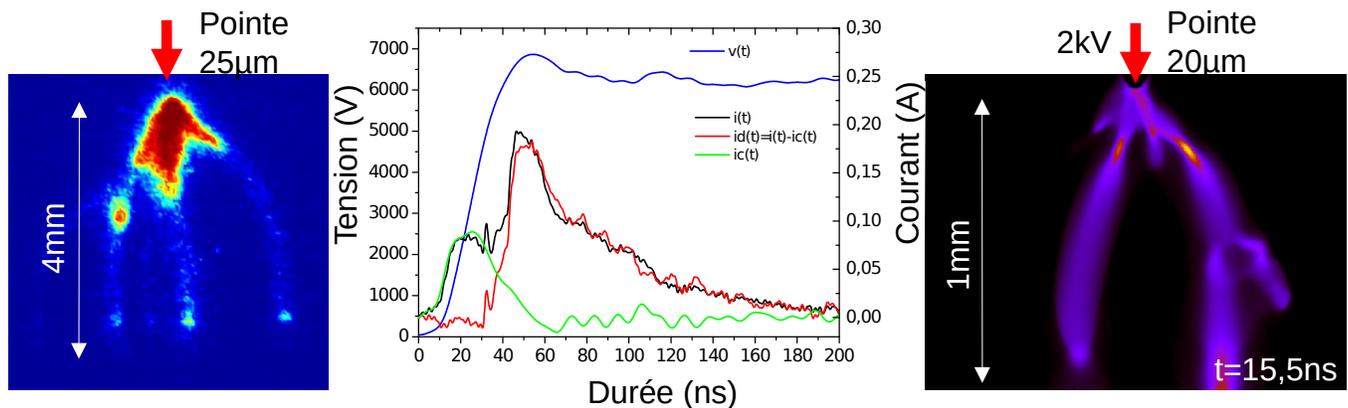
Olivier DUCASSE, Université de Toulouse 3, Paul Sabatier, ducasse@laplace.univ-tlse.fr

Encadrement :

Olivier DUCASSE, LAPLACE de l'UT3 (directeur de Thèse)

Olivier EICHWALD, LAPLACE de l'UT3 (co-directeur de Thèse)

Maxime RIBIERE, CEA de Gramat (co-encadrant de Thèse)



Exemple de résultats expérimentaux (photo et oscillogramme) et théorique (densité électronique)

Résumé :

L'objectif de la thèse est de perfectionner un code de simulation 3D de décharges électriques arborescentes (de type couronne) développé à partir de la librairie MPI (pour tirer profit du calcul haute performance) et de valider le comportement du code et de la physique des Streamers en confrontant les résultats théoriques et expérimentaux (courbes de courant/tension, imagerie rapide, densités d'espèces).

Contexte de l'étude et détails du sujet :

Contexte :

Les décharges arborescentes de type couronne sont composées de multiples filaments conducteurs appelés Streamers. Ces décharges sont souvent précurseurs de phénomènes de claquages (passage à l'arc électrique) mais peuvent également être contrôlées pour générer des espèces chimiquement actives pour le traitement des gaz et des liquides (destruction de traces de molécules médicamenteuses ou phytosanitaires par exemple). De plus, les Streamers ont un diamètre de quelques centaines de micromètre et sont générés sur des durées de quelques centaines de nanosecondes. D'autre part, leur dynamique fait appel à des phénomènes fortement couplés avec des challenges multi-échelles en temps et en espace. Ainsi, l'interaction des Streamers entre eux, la physique de l'extension des Streamers secondaires (précurseurs du claquage) la formation des radicaux et des espèces excitées dans les canaux ionisés, l'influence de la photo-ionisation sont autant de questions qui restent encore en suspens.

Détail du sujet :

Le groupe de recherche Plasmas Réactifs Hors Equilibre du LAPLACE possède les expertises pour réaliser les études expérimentales et de simulations des décharges arborescentes formées par les Streamers.

Le code 3D en configuration pointe-plan développé au sein de l'équipe, couple les équations de transport des espèces chargées, le calcul du champ électrique local et prend en compte la photo-ionisation. De plus, il exploite les ressources du HPC (High Performance Computing) du Supercalculateur du Mésocentre CALMIP (Calcul en Midi-Pyrénées ; 13464 cœurs – 76 To de RAM) au moyen de la parallélisation MPI (Message Passing Interface). D'autre part, la résolution des équations physiques s'appuie sur des algorithmes permettant de stabiliser les forts gradients de densité et la convergence rapide des solutions à chaque pas de temps. Actuellement, les équations elliptiques (de Poisson et de Helmholtz) sont résolues par une méthode itérative (SOR) très performante, mais nécessitant la recherche préalable d'un rayon spectral optimum qui peut évoluer au cours de la résolution et de la géométrie des électrodes. Du reste, la définition du maillage est adaptée à la géométrie mais n'évolue pas dans le temps, et la forme géométrique de la pointe doit être mieux définie dans le maillage. Ainsi, les améliorations qui pourront être envisagées dans le cadre de la Thèse, se rapportent à :

- L'étude de l'algorithme BiCGStab (Bi-Conjugated Gradient Stabilized) pour sa capacité à converger sans avoir recours à un rayon spectral spécifique. C'est un point clé pour améliorer la souplesse d'utilisation du code et la vitesse de convergence dans le cadre de la résolution des équations d'Helmholtz notamment.
- Une meilleure définition de la géométrie de la pointe en intégrant dans le maillage, les positions réelles de ses frontières (différentes méthodes ont été testées en 2D).
- L'élargissement du domaine d'étude pour se rapprocher des conditions expérimentales, avec la possibilité d'intégrer les méthodes d'Adaptative Mesh Refinement (AMR).
- Le développement de la parallélisation hybride MPI/Open-MP, notamment pour les parties de code mettant en jeu des boucles pour prendre en compte davantage d'espèces chargées dans la simulation, tout en maintenant une durée de calcul raisonnable.

Tous ses travaux numériques seront étayés par des données expérimentales macroscopiques (courant, imagerie 3D, spectroscopie) qui par leur confrontation nous mènera à une validation du comportement du code (en l'état et amélioré) et de la physico-chimie des Streamers.