

Simulations multi-échelles d'ondes de choc avec la SDPD

Gérôme FAURE, CEA/DAM Île de France, 91297 Arpajon

Jean-Bernard MAILLET, CEA/DAM Île de France, 91297 Arpajon

Gabriel STOLTZ, CERMICS, 77455 Marne-la-Vallée

La simulation d'ondes de choc et de détonation met en jeu des phénomènes physiques et chimiques se déroulant à des échelles spatiales et temporelles que la dynamique moléculaire ne peut atteindre malgré l'augmentation des puissances de calcul. Cela rend donc nécessaire le développement de méthodes de coarse-graining pouvant modéliser des phénomènes physiques complexes. Par ailleurs, la présence de forts gradients au cours du choc impose de recourir à une méthode conservant l'énergie.

La SDPD (Smoothed Dissipative Particle Dynamics [1]) est une méthode mésoscopique qui repose sur discrétisation particulaire lagrangienne des équations de Navier-Stokes. L'ajout d'un terme de forces stochastiques permet de prendre en compte les fluctuations thermiques lorsque la discrétisation s'effectue à une échelle nanoscopique et de sélectionner ainsi le niveau de résolution auquel le fluide est simulé. L'étude de la cohérence multi-échelle de la SDPD est effectuée dans un premier temps à l'équilibre puis dans des situations hors-équilibre comme les ondes de choc [2].

La modélisation de mécanismes réactifs est réalisée par le biais d'une variable d'avancement associée à chaque particule et permettant un changement progressif de l'équation d'état au cours de la réaction chimique. Ce mécanisme est illustré par la simulation d'ondes de détonation.

Références

- [1] P. ESPAÑOL AND M. REVENGA, *Smoothed dissipative particle dynamics*, Physical Review E, 67 026705, 2003.
- [2] G. FAURE, J. ROUSSEL, J.-B. MAILLET AND G. STOLTZ, *Size consistency in smoothed dissipative particle dynamics*, Physical Review E, 94 043305, 2016.

Gérôme FAURE, CEA/DAM Île de France, 91297 Arpajon

gerome.faure@enpc.fr

Jean-Bernard MAILLET, CEA/DAM Île de France, 91297 Arpajon

jean-bernard.maillet@cea.fr

Gabriel STOLTZ, CERMICS, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, 6-8 avenue Blaise Pascal, Cité Descartes, Champs-sur-Marne, 77455 Marne-la-Vallée

gabriel.stoltz@enpc.fr