

Sujet de thèse 2022 – Programme d'étude

Titre de la thèse : Méthodes de moments pour une simulation efficace et haute fidélité des transferts radiatifs

Mots clefs : méthodes de moments, transfert radiatif, schémas réalisables, conditions aux limites

English title : Moment methods for efficient and high fidelity simulation of radiative transfer

Keywords : moment methods, radiative transfert, realizable schemes, boundary conditions

Profil recherché

Titulaire d'un Master 2 et/ou d'un diplôme d'ingénieur avec une spécialisation dans le domaine des Mathématiques Appliquées et un goût pour l'énergétique ou avec une spécialisation en énergétique et un goût prononcé pour les Mathématiques Appliquées.

Objectifs généraux de la thèse

On propose d'étendre les méthodes de moments pour la simulation du transfert radiatif dans des applications de type propulsion ou écoulements énergétiques comme alternative haute fidélité et à moindre coût aux méthodes de Monte-Carlo couramment utilisées dans ce domaine. Il s'agira en particulier 1-de proposer des fermetures pour ces modèles, adaptées à des configurations physiques de complexité croissantes, 2-d'étudier les conditions aux limites adaptées à ces modèles ainsi que 3-de proposer des schémas numériques d'ordre élevé préservant les états réalisables pour des simulations robustes et précises.

Description de la problématique de recherche

Contexte de l'étude

Le transfert d'énergie par rayonnement au sein de milieux semi-transparents constitue un mécanisme physique essentiel à prendre en compte lors de la modélisation de nombreux systèmes énergétiques, qu'ils s'agissent de systèmes en combustion (foyers aéronautiques, incendies, fours verriers), de jets de systèmes de propulsion, ou de milieux plasmas (arcs électriques, plasmas d'entrées atmosphériques, boules de feu...). Il est en particulier très important de bien décrire la puissance radiative dans le milieu et les flux de chaleurs aux parois. Nous cherchons à développer des méthodes numériques déterministes basées sur la méthode des moments, compétitives en termes d'efficacité et de fiabilité et qui se présentent comme une alternative aux méthodes de Monte-Carlo généralement utilisées dans ce domaine. Elles sont donc un enjeu de recherche majeur, notamment dans les domaines de la propulsion, de l'énergétique ou de la signature infrarouge.

États de l'art

L'équation de transfert radiatif [1, 2, 3] décrit l'évolution de l'intensité du rayonnement. Mais la résolution de cette équation intégral-différentielle reste un défi pour la simulation numérique compte tenu des variations spatiales, directionnelles et spectrales de l'intensité de rayonnement. L'émergence des calculateurs parallèles a ouvert de nouvelles perspectives avec les premières simulations numériques de référence des transferts radiatifs basées sur la méthode de Monte Carlo [4, 5], permettant de tenir compte avec une grande précision de phénomènes complexes comme la diffusion anisotrope par un nuage de particules

ou les fines variations spectrales des propriétés radiatives de mélanges gazeux. Néanmoins ces calculs restent coûteux et sont entachés d'une erreur statistique qui nuit à la robustesse et à la reproductibilité des résultats. Les nombreuses stratégies proposées ces vingt dernières années visant à réduire ou contrôler spatialement ces erreurs *a priori* [6, 7, 8] restent délicates à mettre en œuvre dans le cas général, les mécanismes pilotant les vitesses de convergence de ces algorithmes étant notamment très sensibles aux variations locales d'épaisseur optique (très fréquentes dans le cas de milieux gazeux ou plasmas) : les champs radiatifs obtenus restent en général très bruités spatialement, rendant problématique leur utilisation dans des études de transferts couplés.

Les méthodes déterministes réduisant la dimension de l'équation de transfert radiatif représentent une alternative aux méthodes de Monte-Carlo très intéressante en termes d'efficacité et de fiabilité. Ces méthodes doivent être capables de décrire à la fois des rayonnements isotropes qu'on retrouve près de la source ou très directionnels qu'on retrouve à plus grande distance, ou au voisinage d'une paroi. D'autre part, elles doivent permettre de retrouver des flux sur des parois et donc une attention particulière doit être portée aux conditions aux limites. Enfin, pour une bonne précision des simulations, des schémas numériques d'ordre élevé en espace doivent être développés, adaptés aux propriétés mathématiques des systèmes.

Dans la littérature, trois types de méthodes déterministes sont couramment utilisées : l'approximation diffusive, la méthode des ordonnées discrète et les méthodes de moments. L'approximation diffusive [9, 1, 2, 3], pour lesquelles le champ de rayonnement est considéré à l'équilibre avec le milieu, n'est vraiment adaptée qu'aux systèmes optiquement épais malgré les extensions qui ont pu être mises en œuvre [10, 11, 12, 13]. D'autre part, les conditions aux parois sont alors difficiles à écrire alors que le milieu devient localement mince. La méthode des ordonnées discrètes, ou S_N , [14, 1, 2, 15] est la méthode déterministe la plus populaire pour résoudre l'équation de transfert radiative. Les solutions sont généralement obtenues en utilisant les techniques de marche spatiale, qui sont connues pour être très efficaces pour les problèmes avec une géométrie relativement simple et une physique simplifiée (par exemple, des milieux non diffusants). Cependant, les techniques peuvent perdre de leur efficacité dans les cas avec des géométries complexes et une physique réaliste [16] et donc dans la plupart des applications. Finalement, ces méthodes numériques nécessitent certes un coût de calcul inférieur aux méthodes Monte-Carlo mais qui demeure élevé. La thèse s'intéresse finalement à la dernière famille de méthodes, les modèles aux moments.

Les méthodes des moments

Les méthodes de moments ne résolvent pas directement la dépendance angulaire de l'intensité du rayonnement mais décrivent, à la place, l'évolution d'un ensemble fini d'intégrales angulaires, appelés moments, de celle-ci. Toutefois, ces méthodes présentent des difficultés. Tout d'abord les équations aux moments sont sous-déterminées et nécessitent une fermeture, c'est-à-dire exprimer certains termes en fonction des moments choisis. De plus, les conditions aux limites de l'équation de transfert radiatif ne se transposent pas naturellement à travers la prise de moments et de nouvelles conditions de bords adaptées à celles-ci doivent être développées *a posteriori*. Pour finir, les termes de fermetures généralement choisis sont définis sous condition, dite de réalisabilité, qui caractérise l'existence d'une distribution cinétique sous-jacente et nécessite donc une solution physiquement admissible. La solution numérique doit également rester réalisable à toute étape du calcul pour demeurer bien "définie" et cette condition doit être prise en compte dans le développement de schémas numériques, notamment d'ordre élevé.

Il s'agira donc ici de travailler sur ces trois points, en vue de développer des hiérarchies de méthodes de moments pour la résolution du transfert radiatif et de les évaluer tant en terme de précision qu'en

terme de coût, par rapport à une méthode de Monte-Carlo qui servira de référence.

Fermetures et réalisabilité

Le premier point clef de ces méthodes est la fermeture utilisée. On trouve différents types de fermetures dans la littérature qui passent souvent par une reconstruction de l'intensité radiative à partir des moments. La fermeture la plus utilisée est dérivée en utilisant une expansion harmonique sphérique de l'intensité du rayonnement (méthode dite P_N) [17, 18, 19, 1, 2]. Les coefficients de cette expansion sont calculés à partir des moments via la résolution d'un système linéaire. Mais d'une part, cette méthode ne préserve pas la positivité de l'intensité et peut générer des résultats non physiques, d'autre part, elle n'est généralement précise que dans des milieux à distribution quasi-isotrope.

Les défauts de la méthode P_N ont conduit les chercheurs à développer de meilleurs modèles de fermeture, comme les fermetures M_N basées sur une minimisation d'entropie [20, 21] qui donnent toujours des résultats physiques. Cependant, ces fermetures entropiques qui ont de bonnes propriétés mathématiques (hyperbolicité, entropie), nécessitent généralement la résolution numérique d'un problème d'optimisation convexe en chaque point d'un maillage espace-temps qui, de plus, devient mal conditionné pour les moments qui sont générés par des mesures de Dirac sur l'espace angulaire, c'est-à-dire pour un rayonnement dans une ou plusieurs directions spécifiques.

Plus récemment, d'autres fermetures, hyperboliques ou faiblement hyperboliques, ont été développées en 1D qui permettent à la fois de représenter un rayonnement isotrope ou dans une ou plusieurs directions spécifiques : des méthodes dites EQMOM [22] ou basées sur une projection sur le bord du domaine de réalisabilité des moments [23, 24]. D'autre part, des méthodes inspirées de fermetures interpolatives ont été développées pour reproduire la fermeture obtenue par des méthodes M_1 ou M_2 [25, 26, 27, 28].

La plupart des fermetures précises dans les régimes purement isotropes et purement anisotropes ne sont définies que pour des vecteurs réalisables. En effet, la réalisabilité d'un vecteur caractérise l'existence d'une fonction de distribution positive dont les moments forment ce vecteur, et ces fermetures efficaces sont généralement définies à partir de cette distribution sous-jacente. Des caractérisations numériques de la propriété de réalisabilité sont bien connus pour des moments en 1D ([29]). De telles caractérisations sont en revanche beaucoup plus difficiles à construire en multi-D, et ce problème demeure ouvert aujourd'hui. Quelques caractérisations ont tout de même été proposées dans des cas restreints, notamment pour les moments d'ordre 1 et 2 sur la sphère en 3D ([30]) et sur le disque en 2D.

Programme :

- Dans un premier temps, une étude bibliographique des fermetures possibles en 1D sera effectuée, considérant aussi bien la littérature dédiée au transferts radiatifs que la littérature dédiée à d'autres domaines telles que les populations de particules. En effet, on se ramène alors à des méthodes de moments sur un compact, ici $[-1,1]$. En particulier, on s'intéressera aux méthodes capables de capturer à la fois des rayonnements isotropes et directionnel comme la méthode EQMOM [22], variante pour le transfert radiatif de la méthode de [31], ainsi que la fermeture de [23, 24], qui reste à être implémentée efficacement. Ces méthodes seront comparées en termes de précision et de coût, pour un nombre croissant de moments et sur des configurations 1D représentatives.
- Le cas 3D sera l'objectif final. Ce cas nécessite la construction de fermeture pour des moments sur la sphère unité. Une généralisation des méthodes du cas 1D sera alors étudiée. On pourra aussi étudier l'extension au cas polychromatique en utilisant par exemple des méthodes de moments conditionnées développées dans d'autres applications [32, 33, 34] qui consistent à traiter séparément les variables, de manière hiérarchique, en conditionnant les unes par les autres.
- Le cas 2D sera un cas intermédiaire. L'équation de transfert radiatif est essentiellement 3D dans

sa construction. Hors, la réduction de cette équation en 1D est bien comprise, mais la réduction en 2D est moins intuitive et moins utilisée. Une étude un peu plus approfondie du modèle 3D est nécessaire avant de construire cette réduction 2D et ensuite de construire les modèles aux moments associés. En utilisant les méthodes conditionnées sur l'équation 3D, on arrive à des moments sur le cercle unité, pour lesquels peu de fermetures ont été proposées. En particulier, des extensions des méthodes précédentes seront étudiées.

- Proposer des caractérisations numériques des moments d'ordre élevé sur la sphère.

Condition de bord

Le deuxième point clef est lié aux conditions aux limites. En effet, définir proprement les conditions aux limites pour les méthodes de moments reste un problème ouvert. Quelques solutions partielles ont été proposées dans littérature. Des approches basées sur l'étude du problème du demi-espace (voir par exemple [35, 36]) ou dans le cas particulier des fermetures P_N par exemple dans [37, 38, 39].

Deux difficultés apparaissent : du point de vue du modèle, la conditions aux limite sur l'équation de transfert radiative n'est définie que pour la la moitié de l'espace des phases alors que les moments correspondent à une intégration sur tout l'espace des phases. L'information donnée par la condition de bord cinétique ne correspond donc pas à celle nécessaire pour la condition de bord aux moments. De plus, du point de vue mathématique, l'équation de transfert radiative est une équation cinétique scalaire pour lesquels la construction de condition de bord menant à un problème bien posé est bien comprise. Deux approches sont couramment utilisées pour cela, les approches variationnelles (type Lax-Milgram ou Banach-Necas-Babuska) ou les approches temporelles (type semi-groupes ou Hille-Yosida-Philips). Les équations aux moments en revanche sont des systèmes hyperboliques non-linéaires dont la condition de bord doit mêler une information extérieure et intérieure pour mener à un problème bien posé. Les approches variationnelles sont les plus utilisées en transfert radiatif car elles sont facilement transposables au niveau numérique. Elles ont mené à la construction des conditions de bord de Marshak ou de Mark qui sont couramment utilisées dans ce domaine. Les approches temporelles en revanche sont moins utilisées car l'équation de transfert radiatif est étudiée en régime stationnaire, donc sans temps. Hors celles-ci sont plus proches des méthodes utilisées en hyperbolique et des liens via la méthodes des caractéristiques se font naturellement.

Programme :

- Dans un premier temps, une analyse de l'équation de transfert radiatif en 1D-2D-3D est nécessaire afin de bien comprendre les besoins en condition de bord pour cette équation. Elle se fera via une approche variationnelle et via une approche temporelle en vue de transposer ces méthodes aux niveau moments.
- Dans un second temps, on s'attaquera à proposer une condition de bord pour les équations aux moments qui se base sur la condition de bord cinétique sous-jacente et qui demeure adaptée au système hyperbolique.

Méthodes numériques d'ordre élevé adaptées aux moments et couplage rayonnement-fluide

Enfin, le dernier point concerne les schémas numériques. Il s'agira de construire des schémas numériques à la fois robustes et précis pour le système couplé fluide-rayonnement.

Les moments correspondant à une mesure positive satisfont des contraintes dites de réalisabilité (entre autre positivité du moment d'ordre 0 et de la matrice de covariance). Celles-ci dépendent du domaine d'intégration. Dans le cas 1D des moments sur $[-1,1]$, ces contraintes s'écrivent comme la positivité de déterminants de Hankel [40]. Dans le cas 2D de moments sur le cercle unité, elles s'écrivent comme la

positivité de déterminants de Toeplitz [40]. Mais dans le cas 3D de moments sur la sphère unité, la réalisabilité n'est pas toujours entièrement caractérisée et dépend du choix des moments considérés, qui va en général de pair avec la fermeture choisie.

Il a été montré que des schémas, notamment explicites d'ordre élevés, peuvent dans certains cas aboutir à des moments non réalisables et donc non physiques [41]. Des solutions utilisant des schémas volumes finis explicites en temps ont pu être apportées dans d'autres applications, comme par exemple dans [42] qui pourront être transposés au cas du transfert radiatif. Cependant, pour les applications visées où les échelles temporelles du transfert radiatif sont très faibles devant celle du fluide, il s'agira de développer des méthodes implicites. Dans un premier temps, des méthodes semi-implicites pourront être étudiées dans l'esprit de [43, 44], où le terme de couplage est implicite.

Programme :

- Construire des schémas numériques d'ordre élevé pour les systèmes aux moments préservant la réalisabilité en 1D-2D-3D.
- Proposer des couplages implicites efficaces entre les équations de rayonnement et celle du fluide.

Encadrement

La thèse sera dirigée par Frédérique Laurent-Nègre, du laboratoire EM2C, CentraleSupélec et de la Fédération de Mathématiques de CentraleSupélec et co-encadrée par Laurent Soucasse et Philippe Rivière du laboratoire EM2C, CentraleSupélec et Teddy Pichard du CMAP, Ecole Polytechnique. Il s'agit d'une équipe pluridisciplinaire composée de deux chercheurs en mathématiques appliquées spécialistes des méthodes de moments (F. Laurent-Nègre et T. Pichard) et de deux chercheurs en ingénierie spécialistes des transferts thermiques (L. Soucasse et P. Rivière).

Contact : Frédérique Laurent-Nègre, frederique.laurent@centralesupelec.fr

Références

- [1] Michael F. Modest. *Radiative Heat Transfer*. Academic Press, Elsevier, 2013. 3rd Edition.
- [2] Gerald C Pomraning. *The equations of radiation hydrodynamics*. Courier Corporation, 2005.
- [3] Dimitri Mihalas and Barbara Weibel Mihalas. *Foundations of radiation hydrodynamics*. Courier Corporation, 2013.
- [4] Joseph A Fleck Jr and JD Cummings Jr. An implicit Monte Carlo scheme for calculating time and frequency dependent nonlinear radiation transport. *Journal of Computational Physics*, 8(3) :313–342, 1971.
- [5] John R Howell. The Monte Carlo method in radiative heat transfer. *J. Heat Transfer*, 120(3) :547–560, 1998.
- [6] L. Soucasse, Ph Rivière, and A. Soufiani. Monte Carlo methods for radiative transfer in quasi-isothermal participating media. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 128 :34–42, 2013.
- [7] Y. F. Zhang, O. Gicquel, and J. Taine. Optimized Emission-based Reciprocity Monte Carlo Method to speed up computation in complex systems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 55(25–26) :8172–8177, 12 2012.
- [8] Francis Dupoirieux, Lionel Tessé, Sébastien Avila, and Jean Taine. An optimized reciprocity Monte Carlo method for the calculation of radiative transfer in media of various optical thicknesses. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 49(7-8) :1310–1319, 4 2006.
- [9] Gordon L Olson, Lawrence H Auer, and Michael L Hall. Diffusion, p1, and other approximate forms of radiation transport. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 64(6) :619–634, 2000.
- [10] DA Knoll, WJ Rider, and GL Olson. An efficient nonlinear solution method for non-equilibrium radiation diffusion. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 63(1) :15–29, 1999.

- [11] VA Mousseau, DA Knoll, and WJ Rider. Physics-based preconditioning and the newton–krylov method for non-equilibrium radiation diffusion. *Journal of computational physics*, 160(2) :743–765, 2000.
- [12] David S Kershaw. Flux limiting nature’s own way—a new method for numerical solution of the transport equation. Technical report, Lawrence Livermore National Lab.(LLNL), Livermore, CA (United States), 1976.
- [13] CD Levermore and GC Pomraning. A flux-limited diffusion theory. *The Astrophysical Journal*, 248 :321–334, 1981.
- [14] W. A. Fiveland. Discrete-Ordinates Solutions of the Radiative Transport Equation for Rectangular Enclosures. *Journal of Heat Transfer*, 106(4) :699–706, 11 1984.
- [15] Edward W Larsen and Jim E Morel. Advances in discrete-ordinates methodology. *Nuclear Computational Science*, pages 1–84, 2010.
- [16] Marc RJ Charest, Clinton PT Groth, and Ömer L Gülder. Solution of the equation of radiative transfer using a newton–krylov approach and adaptive mesh refinement. *Journal of Computational Physics*, 231(8) :3023–3040, 2012.
- [17] Sandip Mazumder and Michael F. Modest. A probability density function approach to modeling turbulence-radiation interactions in nonluminous flames. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 42(6) :971–991, 1999.
- [18] Genong Li and Michael F. Modest. Importance of Turbulence-Radiation Interactions in Turbulent Diffusion Jet Flames . *Journal of Heat Transfer*, 125(5) :831–838, 09 2003.
- [19] Ankur Gupta, Michael F. Modest, and Daniel C. Haworth. Large-Eddy Simulation of Turbulence-Radiation Interactions in a Turbulent Planar Channel Flow. *Journal of Heat Transfer*, 131(6), 04 2009. 061704.
- [20] Bruno Dubroca and Jean-Luc Feugeas. Theoretical and numerical study on a moment closure hierarchy for the radiative transfer equation. *Comptes Rendus de l’Academie des Sciences Series I Mathematics*, 329(10) :915–920, 1999.
- [21] Cory D Hauck. High-order entropy-based closures for linear transport in slab geometry. *Communications in Mathematical Sciences*, 9(1) :187–205, 2011.
- [22] V. Vikas, C.D. Hauck, Z.J. Wang, and R.O. Fox. Radiation transport modeling using extended quadrature method of moments. *Journal of Computational Physics*, 246 :221–241, 2013.
- [23] Teddy Pichard. A moment closure based on a projection on the boundary of the realizability domain : 1D case. *Kinet. Relat. Models*, 13(6) :1243–1280, 2020.
- [24] Teddy Pichard. A moment closure based on a projection on the boundary of the realizability domain : Extension and analyzis. submitted, January 2022.
- [25] T. Pichard, G. W. Alldredge, S. Brull, B. Dubroca, and M. Frank. An approximation of the m_2 closure : Application in radiotherapy dose simulation. *J. Sci. Comput.*, 71 :71–108, 2017.
- [26] R. Li and W.-M. Li. 3d b2 model for radiative transfer equation. *International Journal of Numerical Analysis and Modeling*, 17 :118–150, 2019.
- [27] Joachim AR Sarr and Clinton PT Groth. A second-order maximum-entropy inspired interpolative closure for radiative heat transfer in gray participating media. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 255 :107238, 2020.
- [28] JAR Sarr, CPT Groth, and JCT Hu. A maximum entropy-inspired interpolative closure for the prediction of radiative heat transfer in laminar co-flow diffusion flames. *Combustion Science and Technology*, 194(1) :45–79, 2022.
- [29] R. Curto and L. Fialkow. Recursiveness, positivity, and truncated moment problem. *Houston j. Math.*, 17(4) :603–635, 1991.
- [30] D. Kershaw. Flux limiting nature’s own way. Technical report, Lawrence Livermore Laboratory, 1976.
- [31] C. Yuan, F. Laurent, and R.O. Fox. An extended quadrature method of moments for population balance equations. *Journal of Aerosol Science*, 51(0) :1 – 23, 2012.

- [32] C. Yuan and R. O. Fox. Conditional quadrature method of moments for kinetic equations. *Journal of Computational Physics*, 230 :8216–8246, 2011.
- [33] A. Vié, F. Laurent, and M. Massot. Size-velocity correlations in hybrid high order moment/multi-fluid methods for polydisperse evaporating sprays : Modeling and numerical issues. *Journal of Computational Physics*, 237 :177 – 210, 2013.
- [34] C. Chalons, R. O. Fox, F. Laurent, M. Massot, and A. Vié. Multivariate Gaussian extended quadrature method of moments for turbulent disperse multiphase flow. *Multiscale Modeling and Simulation : A SIAM Interdisciplinary Journal*, 15(4) :1553–1583, 2017.
- [35] François Golse, Shi Jin, and C. David Levermore. A domain decomposition analysis for a two-scale linear transport problem. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 37(6) :869–892, 2003.
- [36] Alain Bensoussan, Jacques-L. Lions, and George C. Papanicolaou. Boundary layers and homogenization of transport processes. *Publ. Res. Inst. Math. Sci.*, 15(1) :53–157, 1979.
- [37] Edward W. Larsen and G.C. Pomraning. p_n theory as an asymptotic limit of transport theory in planar geometry. i. analysis. *Nuclear Science and Engineering*, 109(1) :49–75, 1991.
- [38] Robert P. Rulko, Edward W. Larsen, and G.C. Pomraning. p_n theory as an asymptotic limit of transport theory in planar geometry. ii. numerical results. *Nuclear Science and Engineering*, 109(1) :76–85, 1991.
- [39] B.D. Ganapol, C.T. Kelley, and G.C. Pomraning. Asymptotically exact boundary conditions for the p_n equations. *Nuclear Science and Engineering*, 114(1) :12–19, 1993.
- [40] H. Dette and W. J. Studden. *The theory of canonical moments with applications in statistics, probability, and analysis*. Wiley Series in Probability and Statistics : Applied Probability and Statistics. John Wiley & Sons Inc., New York, 1997. A Wiley-Interscience Publication.
- [41] D. L. Wright. Numerical advection of moments of the particle size distribution in Eulerian models. *Journal of Aerosol Science*, 38(3) :352–369, 2007.
- [42] Frédérique Laurent and Tan Trung Nguyen. Realizable second-order finite-volume schemes for the advection of moment sets of the particle size distribution. *Journal of Computational Physics*, 337 :309–338, 2017.
- [43] A. Klar. An asymptotic-induced scheme for nonstationary transport equations in the diffusive limit. *SIAM J. Numer. Anal.*, 35 :1073–, 1998.
- [44] Ryan G McClarren, Thomas M Evans, Robert B Lowrie, and Jeffery D Densmore. Semi-implicit time integration for pn thermal radiative transfer. *Journal of Computational Physics*, 227(16) :7561–7586, 2008.