

PROPOSITION DE SUJET DE THESE

Intitulé : Nouveaux outils de simulation pour les écoulements hybrides dense-raréfié : méthodes de moments et schémas de relaxation.

Référence : MFE-DMPE-2025-05
(à rappeler dans toute correspondance)

Début de la thèse : Octobre 2025

Date limite de candidature : 31 Mai 2025

Mots clés

Propulsion fusée à haute altitude, écoulements raréfiés, couplage fluide-raréfié, méthode des moments, schémas numériques avancés, simulation numérique et calcul intensif

Profil et compétences recherchées

Formation : grande école d'ingénieurs et master 2 à dominante mécanique des fluides ou mathématiques appliquées.

Qualités personnelles : autonomie, sens relationnel, maîtrise de la programmation C++ et python, bon niveau en anglais, qualité d'expression scientifique orale et écrite.

Contexte du projet doctoral

Les écoulements raréfiés sont rencontrés dans de nombreuses applications étudiées à l'ONERA : systèmes hypersoniques, rentrée atmosphérique ou encore jet d'un moteur-fusée à très haute altitude. La simulation de ces écoulements reste cependant délicate, et nécessite l'usage de méthodes spécifiques.

Le niveau de raréfaction est quantifié via le nombre de Knudsen (Kn), défini comme le rapport du libre parcours moyen dans le gaz sur une longueur caractéristique. Dans les écoulements classiquement étudiés, on a $Kn \ll 1$: l'écoulement est dit continu et peut être modélisé par les équations de Navier-Stokes usuelles. Dans les cas où $Kn \gg 1$, l'écoulement est dit fortement raréfié : les équations de Navier-Stokes ne sont alors plus représentatives des phénomènes physiques à l'œuvre [1]. Dans les cas où $Kn \approx 1$, un régime de transition est atteint, particulièrement difficile à simuler [2]

L'étude d'un écoulement fortement raréfié nécessite de revenir aux bases de la mécanique des fluides : la physique statistique. L'état du fluide n'est plus simplement décrit par sa température ou sa vitesse locale, mais par la distribution en vitesse des molécules le composant. L'évolution de cette distribution est décrite par l'équation de Boltzmann, que l'on cherche alors à résoudre. Une approche populaire est la méthode DSMC (Direct Simulation Monte Carlo) [3] qui va estimer ces distributions par une simulation direct des interactions entre les molécules du gaz et une approche stochastique. Cette méthode, déjà employée à l'ONERA [4,5], permet d'obtenir des résultats précis. Un exemple d'application de la méthode DSMC est présenté en Fig. 1, chaque point représentant une particule simulée.

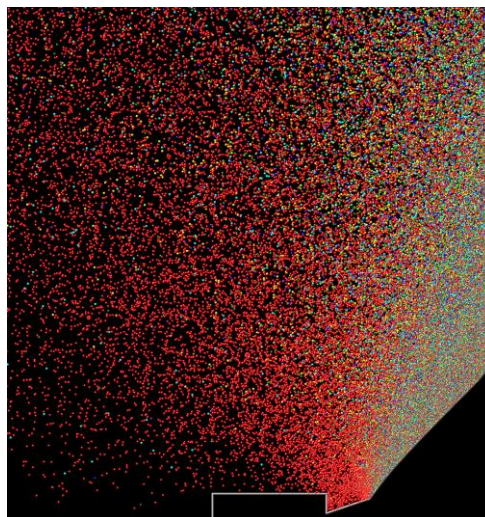


Figure 1 : Simulation NS-DSMC du jet d'un moteur fusée à haute altitude (A. Clout, ONERA)

L'approche DSMC souffre cependant d'une augmentation drastique de son coût de calcul à mesure que l'écoulement se rapproche du régime continu et que le nombre de molécules à modéliser augmente [3]. Ce défaut devient particulièrement problématique lors de la simulation d'un de jet moteur-fusée à haute altitude. En effet, le niveau de raréfaction varie fortement au sein de l'écoulement : celui-ci reste continu dans le cœur du jet, mais devient très raréfié dans le reste du domaine. Afin d'éviter le coût de calcul prohibitif de la DSMC dans les zones continues, une approche usuelle est de résoudre la zone continue avec un solveur Navier-Stokes classique, tandis que le reste du champ raréfié est résolu par DMSC. Les deux solveurs sont ensuite couplés via une interface délimitant les deux zones. Cette interface, visible en Fig. 1, reste cependant difficile à définir en pratique. La mise en place d'une méthode de couplage précise entre les deux codes et l'obtention d'une solution prédictive dans l'ensemble du domaine sont par ailleurs des tâches délicates.4

Objectif

En considérant ces limitations, l'objectif de cette thèse est de participer au développement d'une méthode numérique capable de résoudre plus efficacement ce type d'écoulement à niveau de raréfaction variable, et de manière prédictive dans l'ensemble du domaine.

En particulier, cette thèse explorera une approche alternative à la DSMC : la méthode des moments [2,6,7]. Cette technique propose de rechercher les moments de la fonction de distribution en vitesse des molécules, plutôt que de chercher à l'estimer directement. En effet, l'ingénieur est le plus souvent intéressé par des grandeurs moyennées statistiquement comme la densité, la température ou la vitesse de l'écoulement : ce sont les premiers moments de la fonction de distribution des molécules du gaz, d'où le nom de l'approche.

Travaux envisagés

Le doctorant commencera par une période de prise en main des concepts liés à la méthode des moments, Par la suite, il évaluera les performances de différentes variantes modernes de la méthode des moments [8,9,10,11,12,13,14] sur des cas tests académiques. Dans un premier temps, les travaux considéreront le cas mono-espèce. Le doctorant pourra par la suite étudier le cas multi-espèces ainsi que la modélisation des collisions entre les molécules du gaz. Le doctorant s'intéressera en particulier au coût de calcul, à la robustesse, au comportement asymptotique ainsi qu'à l'impact de la précision de la solution en fonction du nombre moments de ces variantes. A cette fin, un code de calcul 1D dédié sera développé en Python ou C++. Les performances seront évaluées en comparant les résultats avec des simulations DSMC de référence. Après cette étape, la méthode de moments la plus précise et robuste sera retenue.

Le doctorant travaillera ensuite sur le développement et l'implémentation d'un schéma de relaxation [15,16] adapté à la hiérarchie de moments sélectionnée, afin de pouvoir résoudre efficacement des écoulements à niveau de raréfaction variable sans avoir à faire intervenir des interfaces de couplage impliquant plusieurs niveaux de modélisation.

Finalement, le doctorant développera un code de calcul 2D implémentant l'ensemble de ses travaux. Le code, développé en C++, sera basé sur la bibliothèque d'adaptation de maillage Samurai [17] développée à l'École Polytechnique - Centre de Mathématiques Appliquées au sein de l'équipe HPC@Maths. Les performances du code résultant seront évaluées sur des cas tests académiques [18,19]. Le code sera finalement utilisé afin de simuler le fonctionnement d'un moteur fusé à haute altitude. Les résultats obtenus seront comparés à des simulations DSMC de référence.

Cette thèse permettra au doctorant d'aborder différentes problématiques liées à la simulation d'écoulements complexes, aux méthodes numériques performantes et de nouvelle génération, ainsi qu'à la théorie cinétique des gaz. Les résultats de la thèse seront présentés à des congrès internationaux et dans des articles scientifiques.

Le sujet de thèse s'appuie sur une collaboration de longue date entre l'ONERA et le Centre de Mathématiques Appliquées de l'École polytechnique, ainsi qu'avec le von Karman Institute for Fluid Dynamics (VKI) à Bruxelles et l'Université de Stanford. Il prend aussi place dans un environnement de recherche au sein du projet CIEDS (Centre Interdisciplinaire d'Etudes pour la Défense et la Sécurité – IP Paris) impliquant un ensemble d'établissements du plateau de Saclay (Ecole polytechnique, ENSTA, CentraleSupélec, ONERA, CEA, VKI). Ce contexte permettra à l'étudiant-e. d'établir des contacts pour la suite de sa carrière grâce aux échanges avec des acteurs scientifiques nationaux et internationaux.

Références

[1]: Ferziger, J. H., & Kaper, H. G. (1972). Mathematical theory of transport processes in gases.

[2]: Groth, C. (2020). Moment closure methods for kinetic equations of complex transport phenomena. Lecture Notes - Gaspard Monge Visiting Professor. Centre de Mathématiques Appliquées (CMAP), Ecole Polytechnique.

- [3]: Bird, G. A. 1994 Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows. Oxford university press.
- [4]: Virgile, C., Albert, A., & Julien, L. (2022). Optimisation of a hybrid NS–DSMC methodology for continuous–rarefied jet flows. *Acta Astronautica*, 195, 295-308.
- [5] : Clout, A., Langenais, A., Dauvois, Y., Miessens, L., & Labaune, J. (2023, July). Hybrid NS-DSMC simulation of a full scale solid rocket motor reactive exhaust at high altitude. In *Joint 10th EUCASS 9th CEAS Conference*.
- [6]: Struchtrup, H. (2005). Macroscopic transport equations for rarefied gas flows.
- [7]: E. Magin, M. Torrilhon, Models and computational methods for rarefied flows, RTO-AVT-194, von Karman Institute lecture series, Rhode-Saint-Genèse, Belgium, 2011
- [8]: Abdelmalik, M. & Van Brummelen, E. 2016 Moment closure approximations of the Boltzmann equation based on ϕ -divergences. *Journal of Statistical Physics* 164 (1), 77–104.
- [9]: Cai, Z. 2021 Moment method as a numerical solver: challenge from shock structure problems. *Journal of Computational Physics* 444, 110593.
- [10]: Chalons, C., Fox, R. O., Laurent, F., Massot, M. & Vié, A. 2017 Multivariate Gaussian Extended Quadrature Method of Moments for Turbulent Disperse Multiphase Flow. *Multiscale Modeling & Simulation* 15 (4), 1553–1583.
- [11]: Vié, A., Chalons, C., Fox, R., Laurent, F. & Massot, M. 2012 A multi-Gaussian quadrature method of moments for simulating high Stokes number turbulent two-phase flows. In *Annual Research Brief of the Center for Turbulence Research – Stanford University*, pp. 309–320.
- [12]: Massot, M., Laurent, F., de Chaisemartin, S., Fréret, L. & Kah, D, 2009, Eulerian multi-fluid models: modeling and numerical methods, Chapitre du livre “Model. Comp. of Nanoparticles Fluid Flows”, pages 1--86, publication NATO RTO-EN-AVT-169, Lectures Notes of the von Karman Institute.
- [13]: Fox, R. O. & Laurent, F. 2022 Hyperbolic quadrature method of moments for the one-dimensional kinetic equation. *SIAM Journal on Applied Mathematics* 82 (2), 750–771.
- [14]: Levermore, C. D. 1996 Moment closure hierarchies for kinetic theories. *Journal of statistical Physics* 83, 1021–1065.
- [15]: Bouchut, F. (2004). Nonlinear stability of finite Volume Methods for hyperbolic conservation laws: And Well-Balanced schemes for sources. Springer Science & Business Media.
- [16] : Boileau, M., Chalons, C., & Massot, M. (2015). Robust numerical coupling of pressure and pressureless gas dynamics equations for eulerian spray DNS and LES. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 37(1), B79-B102.
- [17]: Bellotti, T., Gouarin, L., Massot, M. & Matalon, P. 2024 Samurai code. <https://hpc-math-samurai.readthedocs.io/en/latest/> - <https://hal.science/hal-04545389/en>.
- [18] : Boccelli, S., Parodi, P., Magin, T. E., & McDonald, J. G. (2023). Modeling high-Mach-number rarefied crossflows past a flat plate using the maximum-entropy moment method. *Physics of Fluids*, 35(8).
- [19]: Boccelli, S., Kaufmann, W., Magin, T. E., & McDonald, J. G. (2024). Numerical simulation of rarefied supersonic flows using a fourth-order maximum-entropy moment method with interpolative closure. *Journal of Computational Physics*, 497, 112631.

Collaborations envisagées :

Ecole Polytechnique / Centre de Mathématiques Appliquée

Von Karman Institute for Fluid Dynamics

NASA Ames Research Center – Mountain View California

Laboratoire d'accueil à l'ONERA

Département : Multi-Physique pour l'Energétique

Lieu (centre ONERA) : Palaiseau

Contact et co-direction de la thèse : Pierre Bernigaud

Tél. : 01 80 38 62 33 Email : pierre.bernigaud@onera.fr

Directeur de thèse

Nom : Marc Massot

Laboratoire : Ecole Polytechnique-CMAP

Tél. : 01 69 33 46 28

Email : marc.massot@polytechnique.edu

Pour plus d'informations : <https://www.onera.fr/rejoindre-onera/la-formation-par-la-recherche>