



Evaluation et développement de modèles sous-maille pour la simulation des grandes échelles du mélange turbulent basés sur l'estimation optimale et l'apprentissage supervisé

Antoine Vollant

► **To cite this version:**

Antoine Vollant. Evaluation et développement de modèles sous-maille pour la simulation des grandes échelles du mélange turbulent basés sur l'estimation optimale et l'apprentissage supervisé. Mécanique [physics.med-ph]. Université Grenoble Alpes, 2015. Français. <NNT : 2015GREAI118>. <tel-01315168>

HAL Id: tel-01315168

<https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01315168>

Submitted on 12 May 2016

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THÈSE

Pour obtenir le grade de

DOCTEUR de l'Université GRENOBLE ALPES

Spécialité : **Mécanique des fluides, procédés, énergétique**

Arrêté ministériel : 7 août 2006

Présentée par

Antoine VOLLANT

Thèse dirigée par **Christophe CORRE**
et codirigée par **Guillaume BALARAC**

préparée au sein du **Laboratoire des écoulements géophysiques et industriels (LEGI)**
et de l'**École Doctorale I-MEP²**

Évaluation et développement de modèles sous-maille pour la simulation des grandes échelles du mélange turbulent basés sur l'estimation optimale et l'apprentissage supervisé

Thèse soutenue publiquement le **20 octobre 2015**,
devant le jury composé de :

M. Emmanuel LEVEQUE

Directeur de Recherche CNRS au LMFA, Lyon, Rapporteur

M. Luc VERVISCH

Professeur des Universités à l'INSA de Rouen, Rapporteur

M. Georges-Henri COTTET

Professeur des Universités à l'univ. Joseph Fourier de Grenoble, Président

M. Guillaume BALARAC

Maître de Conférences à l'INP de Grenoble, Co-Directeur de thèse

M. Christophe CORRE

Professeur des Universités à l'école centrale de Lyon, Directeur de thèse



Remerciements

Je remercie les membres de mon jury qui m'ont fait l'honneur de bien vouloir consacrer du temps à la lecture de mes travaux. Je suis très reconnaissant envers Georges-Henri Cottet qui a accepté de présider ce jury, Luc Vervisch et Emmanuel Lévêque pour leurs rapports et l'intérêt qu'ils ont manifesté pendant la soutenance et les questions.

Ensuite mes pensées sont pour mes deux encadrants. Mon directeur de thèse Christophe Corre qui a su être présent dans les moments clés. Je le remercie infiniment pour son aide précieuse qui a permis de valoriser et organiser mes travaux. Mon codirecteur de thèse et guide de tous les jours, Guillaume Balarac. Il a toujours été présent quand je le sollicitais et cela quel que soit le jour et l'heure. Je les remercie tous les deux pour m'avoir confié ce sujet et aussi ils m'ont permis de franchir une étape qui m'a conduit à réaliser mon projet professionnel.

J'ai une pensée pour le père de l'estimateur optimal en SGE : Antoine Moreau. Ma thèse intervient une décennie après ses travaux. Je le remercie pour sa contribution qui a servi de point de départ pour cette thèse et qui a largement participé au bien-fondé théorique de mes démarches.

Ces travaux se sont effectués dans l'équipe MoST du LEGI. Je remercie donc toutes les personnes que j'ai pu côtoyer et qui ont permis de rendre ces trois années agréables.

Je remercie mes amis qui m'ont fait passer de bons moments que ce soit autour d'une bière, d'un bon repas, sur un vélo ou sur un court de squash.

A partir de février 2015 j'ai fait la connaissance de mes nouveaux collègues. Je les remercie tous pour les moments passés et ceux à venir et je les remercie également pour l'aide précieuse qu'ils m'ont apporté dans les derniers moments de la rédaction.

Je tiens à remercier Nicolas Boisson qui m'a fait confiance lorsqu'il m'a embauché. Il m'a permis de finir ces travaux dans des conditions confortables.

Enfin je remercie ma mère et mon père qui m'ont soutenu tout ce temps avec une mention spéciale pour ma maman qui a relu ce manuscrit au pied levé. J'ai également une pensée pour ma famille Calédonienne, ma soeur Karine, mon neveu et filleul Thomas et ma nièce Camille.

Enfin le mot remerciement est bien faible pour parler de tout ce que tu as fait pour moi Sophie. Tu es la personne la plus importante et sans qui tout cela aurait été tout simplement impossible. Grâce à toi je suis devenu docteur et surtout papa. C'est naturellement à toi Sophie que je dédie ce manuscrit.

Sommaire

Nomenclature	vii
Introduction	ix
1 La simulation des grandes échelles du mélange turbulent	1
1.1 Lois de conservation	1
1.1.1 Système d'équations de Navier-Stokes	1
1.1.2 Equation du scalaire passif	4
1.2 La simulation d'écoulements turbulents	8
1.2.1 Simulation des grandes échelles	10
1.2.2 Modèles de sous-maille	14
1.2.3 Comparaison des modèles structurels et fonctionnels	17
2 Méthodologie pour l'analyse et développement de modèles	19
2.1 Performances structurelle et fonctionnelle	19
2.1.1 Performance fonctionnelle	20
2.1.2 Performance structurelle	20
2.2 Estimateur optimal et performance structurelle	20
2.2.1 Définition de l'estimateur optimal	20
2.2.2 Techniques de calcul	21
2.3 Tests <i>a priori</i> et <i>a posteriori</i> d'un modèle sous-maille	24
2.4 Outils numériques : base de données SND	24
2.5 Méthodologies suivies	26
3 Estimateur optimal : outil de diagnostic	29
3.1 Régularisation du modèle du gradient pour le scalaire	30
3.1.1 Décomposition et interprétation physique	30
3.1.2 Régularisation du <i>GM</i> avec le concept d'estimateur optimal	32
3.1.3 Choix d'un coefficient dynamique	35
3.1.4 Examen <i>a priori</i> du modèle proposé	36
3.1.5 Tests <i>a posteriori</i>	37
3.2 Régularisation du modèle du gradient pour la vitesse	42
3.2.1 Régularisation fonctionnelle	43
3.2.2 Régularisation structurelle	45
3.2.3 Procédures de calcul de coefficient dynamique	47
3.2.4 Tests <i>a priori</i> des modèles régularisés	48
3.2.5 Tests <i>a posteriori</i> du modèle régularisé pour la vitesse	50
3.3 Couplage des modèles sous-maille pour la vitesse et le scalaire	56
3.3.1 Décroissance en turbulence homogène isotrope forcée	57
3.3.2 Canal plan	59
3.4 Conclusion	61

4	Estimateur optimal comme modèle sous-maille	63
4.1	Lien entre SGE optimale et estimateur optimal	64
4.2	Modèle sous-maille optimal : variables de modèles classiques	66
4.2.1	Modèles classiques et EO associés	66
4.2.2	Éléments de définitions des EO.	67
4.2.3	Tests <i>a priori</i>	68
4.2.4	Tests <i>a posteriori</i>	70
4.2.5	Conclusions	71
4.3	Choix d'un jeu de variables de conditionnement irréductible et optimal	71
4.3.1	Décomposition complète et irréductible de τ_i	72
4.3.2	Résultats des tests <i>a priori</i>	73
4.4	Modèle sous-maille constitué de réseaux de neurones	75
4.4.1	Réseau perceptron multi-couches et topologie	76
4.4.2	Apprentissage de l'estimateur optimal	78
4.5	Performance du modèle <i>ANNM</i>	80
4.5.1	Tests <i>a priori</i> sur la base de construction du <i>ANNM</i>	81
4.5.2	Tests <i>a posteriori</i>	84
4.5.3	Tests <i>a posteriori</i> du modèle <i>ANNM</i> sur d'autres écoulements	86
4.6	Conclusions	88
5	Coefficients adaptatifs et apprentissage multiobjectifs	89
5.1	Coefficients adaptatifs pour le modèle de Wang <i>et al.</i>	90
5.1.1	Réseau de neurones à apprentissage supervisé avec critères multiobjectifs	92
5.1.2	Optimisation et résultats <i>a priori</i>	95
5.1.3	Tests <i>a posteriori</i> et extension à d'autres écoulements	100
5.1.4	Conclusion	107
5.2	Coefficients adaptatifs pour le modèle de Lund & Novikov	108
5.2.1	Résultats de l'optimisation	109
5.2.2	Tests <i>a priori</i>	111
5.2.3	Tests <i>a posteriori</i>	112
5.3	Conclusion	115
6	Conclusions et perspectives	117
A	Coefficients dynamique du <i>DRGM^v</i>	121
B	Propriétés de l'opérateur différentiel	127
C	Procédure de calcul de \bar{S}_{ij}^\ominus	129
	Bibliographie	131

Nomenclature

Grandeurs physiques

Scalaires

e_{ir}	: erreur irréductible pour l'ensemble de variable de conditionnement $\{\phi_k\}$
e_q	: erreur quadratique pour le modèle <i>Mod</i>
e_f	: erreur fonctionnelle pour le modèle <i>Mod</i>
l_B	: échelle de Batchelor
l_{int}	: échelle intégrale
l_η	: échelle de Kolmogorov
l_λ	: échelle de Taylor
G	: filtre de SGE
Pe	: nombre de Péclet
Pr	: nombre de Prandtl
Re	: nombre de Reynolds
Sc	: nombre de Schmidt
Δ	: longueur des cellules de la discrétisation SND
$\bar{\Delta}$: longueur de coupure de la discrétisation SGE
$\hat{\Delta}$: longueur de coupure des filtres test de SGE
ϵ	: dissipation turbulente
ϵ_θ	: dissipation de variance du scalaire
θ	: scalaire passif
κ	: diffusivité moléculaire
ν	: viscosité cinématique moléculaire

Vectérielles

e_i^k	: composante i du vecteur propre unitaire de la valeur propre numéro k
k_i / \mathbf{k}	: composantes du vecteur d'onde
u_i / \mathbf{u}	: composantes de la vitesse
x_i / \mathbf{x}	: composantes du vecteur position
L_i	: vecteur de Leonard pour le scalaire par analogie avec la vitesse
C_i	: vecteur croisé pour le scalaire
R_i	: vecteur de Reynolds pour le scalaire
λ^k	: valeur propre numéro k
$\tau_i / \boldsymbol{\tau}$: vecteur sous maille de l'équation du scalaire passif filtré
$\omega_i / \boldsymbol{\omega}$: composantes de la vorticit�

Tensorielles

C_{ij}	: tenseur croisé
L_{ij}	: tenseur de Leonard
R_{ij}	: tenseur de Reynolds
S_{ij}	: tenseur symétrique des déformations $1/2(\partial_i u_j + \partial_j u_i)$
τ_{ij}	: tenseur sous maille de l'équation de la QDM filtrée
Ω_{ij}	: tenseur anti-symétrique des rotations $1/2(\partial_i u_j - \partial_j u_i)$

Ensemble

Opérateurs

a'	:	Partie fluctuante de a tel que $a' = a - \langle a \rangle$
$ a $:	norme de a
$\{a_k\}$:	ensemble de k champs scalaires a de conditionnement
$\frac{\partial^n a}{\partial b^n}$	-	dérivé partielle d'ordre n de a par rapport à b
$\partial_b^n a$		
$\langle a \rangle$:	Moyenne de a
$\langle a b \rangle$:	Moyenne de a conditionnée par b
δ_{ij}	:	symbole de Kronecker
ϵ_{ijk}	:	symbole de Levi-civita $(i - j)(j - k)(k - i)/2$
$\bar{a}, \tilde{a}, \hat{a}$:	opérations de filtrage du champ a

Acronymes

<i>AC</i>	:	Adaptative Coefficient
<i>ACLNM</i>	:	AC Lund & Novikov Model
<i>ACWM</i>	:	AC Wang Model
<i>ANNM</i>	:	Artificial Neural Network Model
<i>CFL</i>	:	Courant–Friedrichs–Lewy
<i>DEDM</i>	:	Dynamic Eddy Diffusivity Model
<i>DNTDM</i>	:	Dynamic Non linear Tensor Diffusivity Model
<i>DRGM</i>	:	Dynamic Regularized Gradient Model
<i>DSM</i>	:	Dynamic Smagorinsky Model
<i>GM</i>	:	Gradient Model
<i>MOGA</i>	:	Multi-Objective Genetic Algorithm
<i>QDM</i>	:	Quantité de Mouvement
<i>RANS</i>	:	Reynolds Average Navier-Stokes
<i>RGM</i>	:	Regularized Gradient Model
<i>SGE</i>	:	Simulation des Grandes Echelles
<i>QDNS</i>	:	Quasi Direct Numerical Simulation
<i>SND</i>	:	Simulation Numérique Directe
<i>THI</i>	:	Turbulence Homogène Isotrope
<i>THIF</i>	:	THI Forcée
<i>VLES</i>	:	Very Large Eddy Simulation

Introduction

Dans la nature et en ingénierie, les écoulements turbulents sont omniprésents et se retrouvent dans des domaines aussi variés que l'astrophysique, les écoulements atmosphériques, certaines zones de l'écoulement d'un fleuve, ou encore le panache de fumée sortant d'une cheminée.

La turbulence apparaît naturellement pour dissiper l'énergie injectée et elle est connue pour ses importantes propriétés de mélange. Par conséquent, les écoulements turbulents sont utilisés dans une multitude de processus industriels comme les réacteurs chimiques ou les chambres de combustion. Ces problématiques de mélange sont étudiées par le suivi d'un champ de scalaire passif représentant la concentration des espèces chimiques en présence.

La phénoménologie du comportement du scalaire est liée à son nombre de Schmidt moléculaire Sc défini comme le rapport entre la viscosité cinématique moléculaire ν du fluide et la diffusivité moléculaire κ du scalaire.

Beaucoup de travaux ont été dédiés à l'étude du mélange turbulent en mécanique des fluides numérique. L'origine des difficultés de résolution de ces configurations d'écoulement provient du caractère turbulent du fluide. Ces écoulements sont principalement caractérisés par un comportement chaotique et par un nombre important d'échelles spatiales et temporelles où les phénomènes de plus basses fréquences sont propres à chaque écoulement et contrôlent le mélange turbulent des grandes échelles.

Lorsque le mélange d'un scalaire dans un écoulement turbulent est étudié par la simulation numérique, il est difficile d'envisager une résolution explicite de l'ensemble de la gamme des échelles du mouvement et du mélange dans de nombreuses configurations d'intérêts industriels. Ceci étant posé, les puissances de calculs actuellement disponibles demeurent trop limitées pour permettre la simulation numérique directe de ces configurations. Une approche proposée pour surmonter cette limitation et permettre la réalisation de simulations instationnaires des écoulements du mélange turbulent est la Simulation des Grandes Echelle (SGE). Cette stratégie de modélisation propose de résoudre explicitement les grandes échelles de l'écoulement et de modéliser l'influence des petites échelles sur celles-ci. Cette méthode réduit considérablement la puissance de calcul nécessaire par rapport à une simulation numérique directe tout en résolvant la majorité des phénomènes physiques d'intérêts. L'un des enjeux majeurs de cette approche est le problème de fermeture induit par les échelles sous-maille qui ne sont pas explicitement résolues [80]. Depuis les 30 dernières années, des efforts ont été apportés pour le développement de modèles sous-maille. La SGE du mélange turbulent est au centre de ce travail, où de nouvelles approches originales sont étudiées, basées sur des outils de mathématiques appliquées encore peu ou pas utilisés dans ce domaine.

L'approche la plus répandue en SGE consiste à utiliser un modèle basé sur le nombre de Schmidt de sous-maille à la manière des modèles proposés par Moin *et al.* [57] et Métais & Lesieur [56] pour ne citer qu'eux. Cette approche est qualifiée de "fonctionnelle" car elle tend à reproduire la fonction de dissipation de l'énergie résolue, induite par le transfert de cette énergie aux échelles sous-maille [80]. Cependant, ces modèles reproduisent mal le terme sous-maille lui-même et peuvent faire preuve de sur-dissipation. Une autre classe de modèle, qualifiée de "structurelle", est basée sur des opérations de filtrage ou de développements en série de Taylor qui sont conçus pour reproduire fidèlement le terme sous-maille lui-même [80]. Cependant, ces modèles tendent à mal prédire la dissipation sous-maille et conduisent à des simulations instables. Un premier point important des présents travaux de thèse est de fournir des diagnostics des modèles sous-maille en prenant en compte leur comportement à la fois fonctionnel (capacité à reproduire la fonction de dissipation de l'énergie résolue) et structurel (capacité à représenter le terme sous-maille).

Ce travail s'inscrit dans le prolongement des travaux initiés par Antoine Moreau [58] il y a près d'une décennie. Dans ses travaux [59], A. Moreau développe la notion d'estimateur optimal dans le contexte de la SGE de la variance de scalaire sous-maille pour des applications liées à la combustion. La notion d'estimateur optimal est un outil qui permet à A. Moreau - et va nous permettre également dans ce mémoire - de poser un diagnostic sur le potentiel d'amélioration structurel d'un modèle. En conclusion de ses travaux [59], A. Moreau suggère l'utilisation de l'estimateur optimal directement en modèles sous-maille par le biais de réseaux de neurones. Nous reprenons et concrétisons cette idée dans le présent mémoire en faisant appel à des réseaux de neurones d'une part pour reproduire le comportement de l'estimateur optimal comme modèle sous-maille mais aussi pour modéliser des coefficients dynamiques. Dans ce mémoire, nous faisons une utilisation large de la notion d'estimateur optimal puisque nous ferons successivement appel à cet outil pour :

- améliorer des modèles algébriques existants en exploitant les diagnostics de performance déduits de l'utilisation de l'estimateur optimal.
- construire un modèle sous-maille de type structurel en utilisant directement l'estimateur optimal comme approximation du terme sous-maille, avec utilisation d'un réseau de neurones comme modèle substitut
- développer une stratégie hybride dans laquelle une forme fonctionnelle est adoptée pour le modèle sous-maille avec des coefficients dynamiques dont l'évaluation est réalisée à partir de réseaux de neurones cherchant à optimiser les performances fonctionnelles et structurelles du modèle.

Au-delà des modèles sous-maille ainsi construits, l'objectif de ce travail est d'évaluer de nouvelles méthodologies permettant la construction systématique de modèles sous-maille. Ce mémoire est organisé en 5 chapitres.

Le **chapitre 1** est dédié à un état de l'art sur les notions abordées dans ce manuscrit. Les équations régissant le mélange turbulent ainsi que les phénomènes pilotant le mélange seront rappelés. La difficulté de la simulation numérique directe de ces phénomènes nous conduit à étudier de façon privilégiée la stratégie de SGE. Les équations filtrées des phénomènes de mélange conduisent à modéliser des termes supplémentaires pour fermer les équations. Dans le domaine de la modélisation des termes de sous-maille, Sagaut [80] propose de classer les modèles en deux catégories : modèle fonctionnel d'une part et modèle structurel d'autre part. Nous exploiterons cette classification dans la suite du mémoire pour évaluer des modèles existants et en développer de nouveaux, en faisant appel de façon systématique au concept d'estimateur optimal.

Le **chapitre 2** sera consacré à la présentation des outils et concepts utilisés dans ces travaux pour mener à bien les développements des modèles sous-maille des chapitres suivants. Une première notion clef est la performance structurelle et fonctionnelle des modèles sous-maille qui sera mesurée dans des tests *a priori* pour évaluer les modèles. Un deuxième concept sera la notion d'estimateur optimal qui permettra de diagnostiquer les performances structurelles des modèles et ainsi de les améliorer. Enfin, les développements de modèle s'appuieront tous sur une connaissance *a priori* des termes exacts. Ces évaluations feront donc appel à des bases de données de SND, qui permettront d'effectuer des diagnostics *a priori* et d'entraîner des modèles sous-maille faisant appel à des réseaux de neurones.

Le **chapitre 3** propose d'améliorer les performances structurelles et fonctionnelles d'un modèle sous-maille structurel classique. A cet effet, une régularisation sera proposée et l'estimateur optimal sera utilisé comme outil de diagnostic. Ces améliorations *a priori* seront validées *a posteriori* sur différentes configurations d'écoulements. Ces améliorations s'appliqueront sur les déclinaisons scalaire et vitesse de ce modèle sous-maille. Pour finir, des tests *a posteriori* sur des SGE de vitesse et de scalaire couplées seront conduits pour évaluer les performances de cette nouvelle famille de modèles par rapport à la famille d'origine.

Le **chapitre 4** propose l'utilisation de l'estimateur optimal directement en modèle sous-maille. L'objectif est de construire un modèle ayant la meilleure performance structurelle que peut fournir son jeu de variables. Après des tests sur des modèles classiques qui montrent une amélioration de la performance structurelle sur les tests *a priori* puis sur des tests *a posteriori*, le concept est étendu à un modèle sous-maille se basant sur un plus grand nombre de variables et utilisant des modèles substituts

de type réseaux de neurones pour calculer l'estimateur optimal. Cependant les tests *a posteriori* de ces modèles vont montrer des lacunes d'universalité dès que les configurations simulées s'éloigneront de celles utilisées pour construire les modèles.

Le **chapitre 5** propose finalement d'utiliser les réseaux de neurones pour construire des procédures de calcul de coefficients dynamiques sur des modèles sous-maille dont la forme est postulée à partir de développements vectoriels et tensoriels des termes sous-maille. Une méthode d'apprentissage des réseaux de neurones basée sur une optimisation bi-objectifs est alors mise en place. Cette optimisation vise à fixer les paramètres du réseau de neurones, fonction de substitution de l'estimateur optimal, de façon à optimiser simultanément les performances fonctionnelle et structurelle des modèles sous-maille développés. Des conclusions générales sur l'apport de l'estimateur optimal et des réseaux de neurones dans la construction de modèles sous-maille pour le mélange turbulent sont finalement tirées sur la base des résultats obtenus dans ces travaux et des perspectives précises de développement de modèles pour la SGE sont proposées.

Chapitre 1

La simulation des grandes échelles du mélange turbulent

Sommaire

1.1 Lois de conservation	1
1.1.1 Système d'équations de Navier-Stokes	1
1.1.2 Equation du scalaire passif	4
1.2 La simulation d'écoulements turbulents	8
1.2.1 Simulation des grandes échelles	10
Filtres classiques de la SGE	11
Equations d'évolution filtrées de la SGE	12
1.2.2 Modèles de sous-maille	14
Modèles fonctionnels	14
Modèles structurels	16
1.2.3 Comparaison des modèles structurels et fonctionnels	17

1.1 Lois de conservation

Les phénomènes de mélange d'un scalaire passif dans un écoulement turbulent vont être numériquement simulés via la résolution des équations de la dynamique des fluides et de transport du scalaire. Cette introduction a pour objectif de présenter synthétiquement les équations régissant ces phénomènes, ainsi que la physique associée.

1.1.1 Système d'équations de Navier-Stokes

Les fluides newtoniens en écoulement incompressibles dans un repère Galiléen à coordonnées cartésiennes sont régis par les équations de Navier-Stokes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \\ \frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_j^2} \end{array} \right. \quad (1.1)$$

où P est la pression, ρ la masse volumique, u_i les composantes de la vitesse et ν la viscosité cinématique moléculaire. Il s'agit d'un système d'équations différentielles à dérivées partielles pour lequel n'existe pas à ce jour de preuve d'existence et d'unicité de solution (sauf dans ces cas d'écoulements très simplifiés) En réalité, l'écoulement n'est caractérisé que par son champ de vitesse, car en prenant la divergence de l'équation vectorielle de la quantité de mouvement, l'hypothèse d'incompressibilité conduit à l'équation de Poisson :

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial^2 P}{\partial x_i^2} \quad (1.2)$$

L'écriture de la pression est simplifiée $p = P/\rho$ pour alléger les écritures. En définissant la longueur caractéristique de l'écoulement L et la vitesse caractéristique U

$$t^* = \frac{tU}{L} \quad x^* = \frac{x}{L} \quad U_i^* = \frac{u_i}{U} \quad p^* = \frac{P}{\rho U^2}, \quad (1.3)$$

il vient une nouvelle écriture de l'équation de la conservation de quantité de mouvement du système (1.1) :

$$\frac{\partial U_i^*}{\partial t^*} + U_j^* \frac{\partial U_i^*}{\partial x_j^*} = -\frac{\partial p^*}{\partial x_i^*} + \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 U_i^*}{\partial x_j^{*2}} \quad (1.4)$$

où $Re = UL/\nu$ est le nombre de Reynolds. Ce nombre caractéristique indique le régime de l'écoulement en exprimant le rapport entre les effets d'inertie et les effets visqueux. Dans le cas des faibles nombres de Reynolds, les forces visqueuses sont prépondérantes, ce qui conduit à un écoulement laminaire. A fort nombre de Reynolds, ce sont les effets d'inertie du fluide qui vont dominer et l'écoulement est alors turbulent.

Comme indiqué dans l'introduction générale du mémoire, les écoulements de fluides rencontrés dans le contexte industriel ou géophysique se produisent majoritairement dans un régime turbulent, qui se caractérise par une multitude d'échelles spatiales et temporelles dans l'écoulement. Les échelles spatiales sont comprises entre l'échelle intégrale l_{int} qui est une longueur macroscopique de l'ordre des plus grandes dimensions de l'écoulement et l'échelle de dissipation visqueuse qui est une longueur en dessous de laquelle il n'y a plus de variations significatives des composantes de la vitesse du fluide, de sorte que le nombre de Reynolds basé sur cette échelle est de l'ordre de l'unité.

Un autre aspect de ces écoulements est leur caractère imprévisible qui rend la résolution des équations particulièrement complexe. Cet état chaotique apparaît en réponse à l'apport excessif d'énergie aux grandes échelles. Cet état conduit à des transferts énergétiques qui se manifestent sous la forme de structures tourbillonnaires emboîtées les unes dans les autres jusqu'à atteindre l'échelle de dissipation où cette énergie est convertie en chaleur.

Dans ce manuscrit, les écoulements simulés et/ou modélisés seront en majorité des cas de Turbulence Homogène et Isotrope (THI) dans un domaine cubique et périodique dans les trois directions à des nombres de Reynolds assez élevés pour que la théorie de Kolmogorov [41] puisse s'appliquer. La THI est représentative de ce qui se passe au coeur des écoulements turbulents (loin des parois et des régions de forts cisaillements). Les propriétés de l'écoulement sont invariantes par rotation et translation,

$$\langle u_i(x_i, t) \rangle = 0. \quad (1.5)$$

Kolmogorov a contribué à plusieurs avancées majeures dans la compréhension et la formalisation des phénomènes turbulents. Il a notamment établi la loi d'échelle du spectre de l'énergie cinétique [41] en s'appuyant sur la théorie de Richardson [74]. Ce dernier suggéra l'idée d'une cascade d'énergie vers les petites échelles. A partir d'un certain nombre de Reynolds, les structures tourbillonnaires à l'échelle de l'écoulement moyen l_{int} sont génératrices de tourbillons à des échelles un peu plus petites, qui eux-mêmes génèrent des mouvements à des échelles plus petites, *etc...* Ce processus de cascade d'énergie se termine finalement lorsque les mouvements de très petites tailles sont dissipés sous l'effet de la viscosité moléculaire. Ce concept de cascade fait abstraction de l'écoulement moyen et se focalise sur l'organisation spatio-temporelle de l'agitation turbulente. En particulier, il ne s'agit pas d'un mouvement localisé à une échelle de mélange mais d'une hiérarchie de mouvements en interaction permanente et réalisant un transfert d'énergie des grandes vers les petites échelles. Cette cascade d'énergie vers les petites échelles s'effectue à un taux d'énergie constant qui s'exprime comme :

$$\epsilon = 2\nu \left\langle \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right\rangle. \quad (1.6)$$

Le taux de dissipation d'énergie cinétique ϵ et la norme du vecteur d'onde k sont les seules variables dont dépend le spectre d'énergie d'après les hypothèses faites sur la phénoménologie de la turbulence.

Par conséquent, le théorème d'analyse dimensionnel a permis à Kolmogorov [41] de conclure sur l'expression :

$$E_u(k) = C_K \epsilon^{2/3} k^{-5/3}, \quad (1.7)$$

où C_K est la constante de Kolmogorov et E_u est la densité spectrale d'énergie cinétique pour le nombre d'onde k . Cette expression est valable dans la zone inertielle du spectre de l'énergie cinétique comprise entre l'échelle intégrale l_{int} et l'échelle de dissipation visqueuse. Comme imaginé phénoménologiquement par Richardson [74], les grands tourbillons cèdent leur énergie vers de plus petits comme le schématise la figure 1.1.

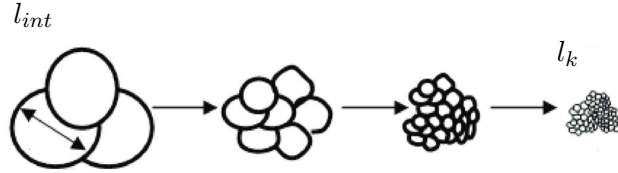


FIGURE 1.1 – Schéma des mécanismes de cascade énergétique où les structures de taille l_{int} représentent les plus grandes structures qui se subdivisent en de plus petites structures jusqu'à atteindre la taille minimale de l_η .

L'échelle de dissipation visqueuse l_η marque la transition de la zone inertielle vers la zone de dissipation visqueuse du spectre de l'énergie cinétique et elle s'exprime comme :

$$l_\eta = \left(\frac{\nu^3}{\epsilon} \right)^{1/4} \quad \tau_\eta = \sqrt{\frac{\nu}{\epsilon}}, \quad (1.8)$$

où τ_η est le temps de retournement caractéristique des plus petits tourbillons avoisinant les échelles dissipatives. La théorie de Kolmogorov permet donc de définir l'amplitude des échelles spatiales et temporelles de résolution dans le cas de la turbulence pleinement développée.

Les échelles de longueur intégrale et de Taylor sont définies à partir du tenseur des corrélations à deux points :

$$R_{ij}(r_k, t) = \langle u_i(x_l, t) u_j(x_l + r_k, t) \rangle \quad (1.9)$$

Dès lors, les fonctions de corrélation longitudinale $f(x, t)$ et transverse $g(x, t)$ se définissent dans le cas d'une THI comme [72] :

$$R_{ij}(r_k, t) = u' \left(g(r_k, t) \delta_{ij} + \left[f(r_k, t) - g(r_k, t) \frac{r_i r_j}{r_m r_m} \right] \right). \quad (1.10)$$

avec $u' = R_{mm}(0, t)$. Dans le cas isotrope, la fonction d'autocorrélation transverse $g(0, t)$ est entièrement définie par la fonction d'autocorrélation longitudinale telle que [72] :

$$g(r_i, t) = f(r_i, t) + \frac{r_i}{2} \frac{\partial f(r_i, t)}{\partial r}. \quad (1.11)$$

La fonction d'autocorrélation longitudinale f permet de décrire statistiquement les phénomènes induits par la cascade d'énergie cinétique. Cette fonction a un comportement globalement monotone décroissant qui est une conséquence de la séparation des échelles. Deux échelles remarquables en sont issues. L'échelle intégrale longitudinale est d'abord définie comme,

$$l_{int} = \int_0^\infty f(r, t) dr. \quad (1.12)$$

Enfin l'échelle de Taylor l_λ longitudinale [90] est définie comme l'intersection de la parabole osculatrice $p(r)$ en $f(0, t)$ avec l'axe des abscisses (cf. figure 1.2), ce qui revient à trouver les racines de la parabole

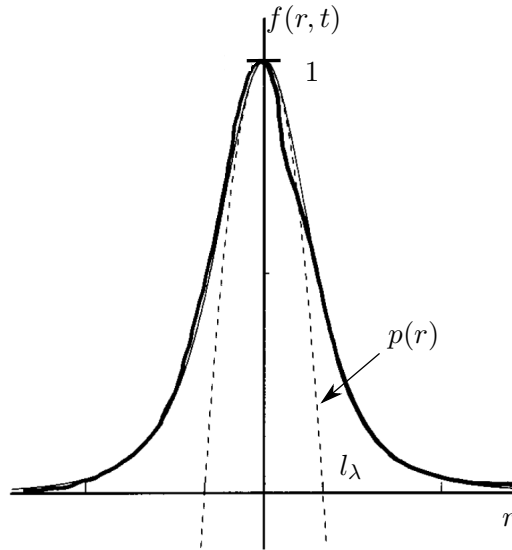


FIGURE 1.2 – Fonction d'autocorrélation longitudinale d'une THI (—) et sa parabole osculatrice $p(r)$ (- - -) en $f(0, t)$ où $p(l_\lambda) = 0$ avec l_λ la longueur caractéristique de Taylor.

d'équation $p(r) = \frac{r^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial r^2} \Big|_{r=0}$. La racine positive l_λ est

$$\left\langle \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \right\rangle = \sqrt{2} \frac{u'}{l_\lambda}, \quad (1.13)$$

où u_1 et x_1 sont des composantes de la vitesse et de la position dans une direction arbitraire de l'espace. Par conséquent, il est possible de définir un nombre de Reynolds à l'échelle de Taylor tel que :

$$Re_\lambda \sim \frac{u' \lambda}{\nu}. \quad (1.14)$$

Le niveau de turbulence des écoulements étudiés dans ce mémoire sera donné à cette échelle. Le nombre de Reynolds Re_λ est relié à celui de l'échelle intégrale par la relation [72] :

$$Re_\lambda = \frac{20}{3} Re_{int} \approx 2.6 \sqrt{Re_{int}}. \quad (1.15)$$

Les écoulements turbulents ont de fortes capacités de mélange et grâce à ces propriétés ils peuvent être vus comme des "accélérateurs" de mélange. Cela s'explique par les temps caractéristiques de diffusion moléculaire d'un scalaire passif qui sont plus longs que les temps convectifs turbulents. Ainsi le mélange d'une espèce chimique ou d'un champ de scalaire, tel qu'une température, sera d'autant plus rapide que l'état de turbulence du fluide sera grand.

1.1.2 Equation du scalaire passif

Dans cette partie, nous nous consacrons à la description de la physique du scalaire et aux mécanismes du mélange turbulent qui ont largement été étudiés par le passé [99]. L'équation décrivant l'évolution d'un scalaire $\theta(x_i, t)$ avec x_i les coordonnées de l'espace, s'écrit comme l'égalité entre la dérivée lagrangienne du scalaire et sa diffusion qui est pilotée par le gradient de scalaire et son coefficient tensoriel de diffusion moléculaire κ_{ij} :

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + u_i \frac{\partial \theta}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\kappa_{ij} \frac{\partial \theta}{\partial x_j} \right). \quad (1.16)$$

Le coefficient de diffusion moléculaire sera, dans ce travail, supposé isotrope et constant ce qui simplifier l'équation (1.16) sous la forme :

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + u_i \frac{\partial \theta}{\partial x_i} = \kappa \frac{\partial^2 \theta}{\partial x_i^2}. \quad (1.17)$$

D'après son équation d'évolution (1.17), le scalaire est borné par les valeurs extrêmes de son champ initial car $\partial^2 \theta / \partial x_i^2$ est positif dans le cas d'un minimum et négatif dans le cas d'un maximum, ce qui entraîne la diminution des valeurs absolues des extremums à chaque instant. L'équation d'évolution (1.17) est linéaire en θ donc son évolution sera identique quelle que soit la transformation affine qui pourrait lui être appliquée. Par conséquent, le scalaire étudié dans ces travaux évoluera entre des bornes voisines de 0 et 1. La distribution spatiale des valeurs du champ de scalaire peut en partie être caractérisée par sa moyenne volumique :

$$\langle \theta \rangle = \frac{1}{V} \int_V \theta(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (1.18)$$

et sa variance $\langle \theta^2 \rangle - \langle \theta \rangle^2$ qui mesure la dispersion des valeurs avec la moyenne. En prenant la moyenne de l'équation (1.17) on obtient $\partial \langle \theta \rangle / \partial t = 0$ car l'intégrale volumique de la diffusion du scalaire est équivalente à l'intégrale surfacique de son flux à travers les limites du volume. Dans notre cas d'étude, les conditions aux limites de la boîte de calcul sont périodiques. Le premier moment statistique de la distribution de scalaire est donc conservé au cours du temps et il vaut une valeur arbitrairement fixée par son initialisation.

Pour obtenir l'équation d'évolution de la variance de scalaire, il faut construire l'expression de l'évolution de la quantité θ^2 en multipliant l'équation (1.17) par 2θ :

$$\frac{\partial \theta^2}{\partial t} + u_i \frac{\partial \theta^2}{\partial x_i} = \kappa \frac{\partial^2 \theta^2}{\partial x_i^2} - \underbrace{2\kappa \frac{\partial \theta}{\partial x_i} \frac{\partial \theta}{\partial x_i}}_{2\kappa \omega_\theta = \epsilon_\theta}, \quad (1.19)$$

avec ω_θ l'enstrophie scalaire. La moyenne de l'équation (1.19) représente exactement la variation de la variance de scalaire¹. Dans ce cas, $\partial_t \langle \theta^2 \rangle = -2\kappa \langle \omega_\theta \rangle < 0$ et donc ne se conserve pas au cours du mélange. En conséquence, le processus de mélange de scalaire tend à homogénéiser les valeurs du scalaire vers sa moyenne à travers le terme de dissipation dans la variance de scalaire.

L'étude de l'évolution de cette dissipation de scalaire qui est à 2κ près celle de l'enstrophie, soit

$$\frac{\partial \epsilon_\theta}{\partial t} + u_j \frac{\partial \epsilon_\theta}{\partial x_j} = \kappa \frac{\partial^2 \epsilon_\theta}{\partial x_i \partial x_j} - 2\kappa^2 \left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial x_i \partial x_j} \right)^2 - 2\kappa \frac{\partial \theta}{\partial x_i} \frac{\partial \theta}{\partial x_j} S_{ij}, \quad (1.20)$$

avec $S_{ij} = 1/2(\partial u_i / \partial x_j + \partial u_j / \partial x_i)$ le tenseur des déformations, montre clairement le rôle joué par le champ de vitesse dans le mélange. La dissipation de scalaire ne se conserve pas au cours du temps à cause des deux termes dissipatifs $2\kappa^2(\partial_i \partial_j \theta)^2$ et $2\kappa \partial_i \theta S_{ij} \partial_j \theta$ et comme attendu, elle est pilotée par la dissipation moléculaire κ . Le premier terme indique que la dissipation est d'autant plus grande que les gradients de scalaire sont grands et le deuxième explicite le rôle des gradients de vitesse dans l'étirement des gradients de scalaire. La turbulence est un "accélérateur" de mélange par le biais des gradients de vitesse qui amplifient la dissipation de scalaire.

En adimensionnant l'équation d'évolution du scalaire (1.17), par les grandeurs de l'expression (1.3) :

$$\frac{\partial \theta}{\partial t^*} + u_i^* \frac{\partial \theta}{\partial x_i^*} = \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 \theta}{\partial x_i^{*2}}, \quad (1.21)$$

le nombre de Peclet, $Pe = Sc Re$, apparaît et il fait intervenir le nombre de Schmidt moléculaire

$$Sc = \frac{\nu}{\kappa}. \quad (1.22)$$

1. également appelée énergie scalaire par analogie avec l'énergie cinétique

Le nombre de Schmidt Sc indique la part des effets visqueux de l'écoulement par rapport aux effets de diffusion moléculaire propre au scalaire sur son mélange, tandis que le nombre de Peclet met les effets d'inertie et de diffusion moléculaire en concurrence. Le nombre de Schmidt moléculaire donne le rapport entre la longueur de l'échelle de dissipation de l'énergie cinétique l_η et l'échelle de dissipation de la variance scalaire l_B dite échelle de Batchelor [7] telle que :

$$l_B = \frac{l_\eta}{Sc} = \left(\frac{\epsilon}{\nu \kappa^2} \right)^{1/4} \quad (1.23)$$

Les figures 1.3 représentent des coupes de champs de scalaire dans un plan (xy) ayant des nombres de Schmidt moléculaire variant de 0.7 à 32. Ils sont tous transportés par le même champ de vitesse ayant un nombre de Reynolds basé sur l'échelle de Taylor $Re_\lambda = 90$.

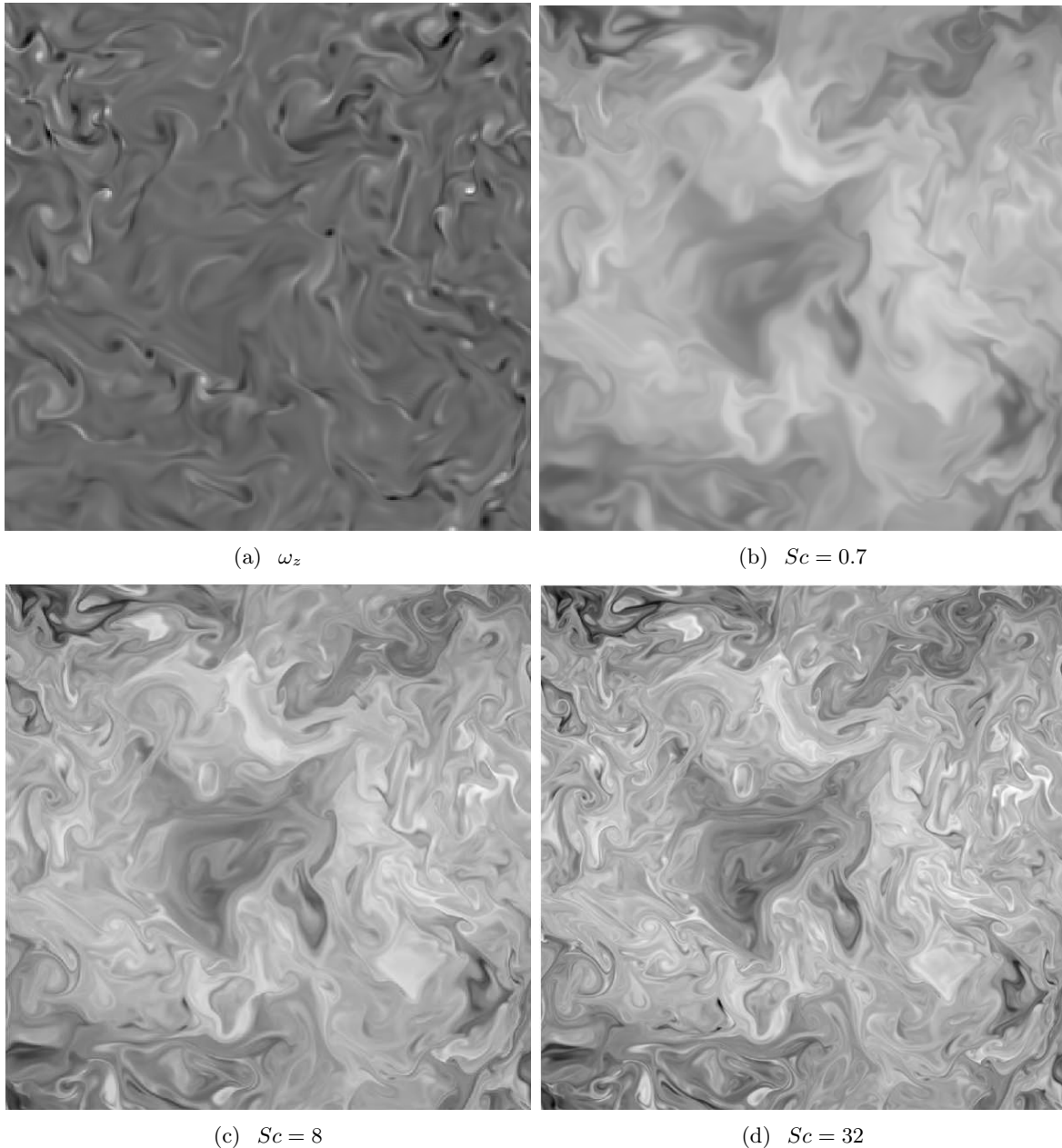


FIGURE 1.3 – Coupes du champ de vorticit  pour $Re_\lambda = 90$ (a) et des scalaires de nombre de Schmidt mol culaire de $Sc = 1$ (b), $Sc = 8$ (c) et $Sc = 32$ (d).

La coupe 1.3(a) montre la composante de la vorticit  orthogonale au plan (xy) . On constate qualitativement que l'augmentation du nombre de Schmidt mol culaire du scalaire provoque l'apparition de

structures de mélange de plus en plus petites devant les structures vorticitaires du champ de vitesse. Ce constat est une conséquence de la diminution de la taille de l'échelle de dissipation par la diffusion moléculaire du scalaire par rapport à l'échelle de dissipation visqueuse du champ de vitesse. Ces différences d'échelles s'observent dans l'espace spectral en comparant les spectres de l'énergie cinétique et de la variance de scalaire. La physique du mélange d'un scalaire passif dans un écoulement turbulent est principalement définie par son nombre de Schmidt moléculaire. Il est naturel de comparer les comportements relatifs des spectres de la variance de scalaire et de l'énergie cinétique en fonction de ce paramètre. De plus ces statistiques globales donnent une représentation pertinente de la phénoménologie du mélange.

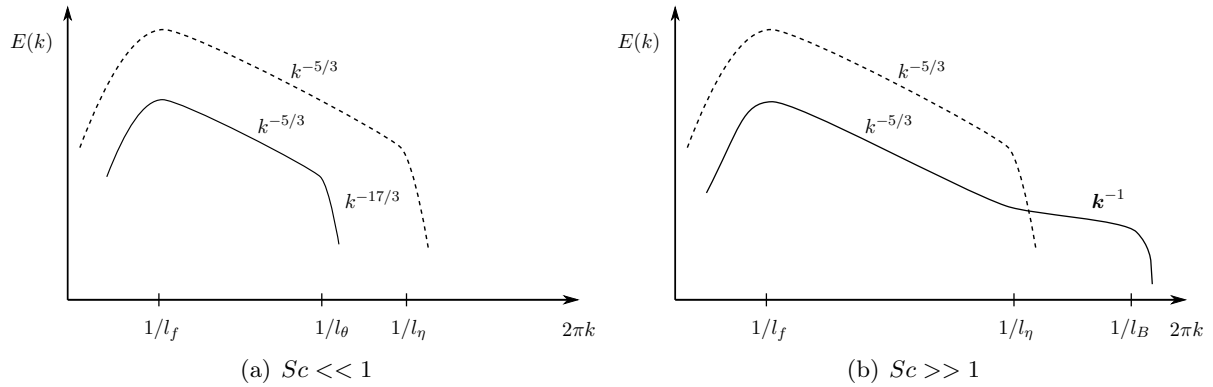


FIGURE 1.4 – Représentation schématique en échelle logarithmique des spectres de la variance de scalaire (—) et de l'énergie cinétique (-----) en fonction de la norme du vecteur d'onde \mathbf{k} pour $Sc \ll 1$ (a) et $Sc \gg 1$ (b).

Les premières approches décrivant la physique du scalaire passif ont été proposées par Corrsin [79] et Obukhov [2] pour les petits nombres de Schmidt moléculaire $Sc \leq 1$. Leur vision de la physique du scalaire est très proche de celle de la turbulence du champ de vitesse proposée par Kolmogorov [41], avec un effet de cascade des structures de scalaire. Cette analogie se traduit par la division successive des structures de scalaire jusqu'à atteindre une échelle minimale l_θ où elles sont dissipées par diffusion moléculaire. Deux cas de figures apparaissent :

- le cas où l'échelle de dissipation par diffusion moléculaire $l_\theta = \eta Sc^{-3/4}$ est petite devant l_η soit $Sc \ll 1$. Ici, le spectre du scalaire représenté sur la figure 1.4(a) présente deux régimes dans sa partie décroissante :

1. le régime **inertiel-convectif** où $k \in [k_f; k_\theta]$. Le scalaire est mélangé par les effets inertiels du champs de vitesse sans influence de sa diffusion moléculaire. Par conséquent, l'expression de son spectre est homogène à :

$$E_\theta(k) \equiv \epsilon_\theta \epsilon^{-1/3} k^{-5/3}. \quad (1.24)$$

2. un régime **inertiel-diffusif** où $k \in [k_\theta; k_\eta]$. Le scalaire subit les effets de sa diffusion moléculaire et d'inertie du champ de vitesse. L'expression du spectre dans cette zone est du type :

$$E_\theta(k) \equiv \epsilon_\theta \epsilon^{2/3} \kappa^{-3} k^{-17/3} \quad (1.25)$$

- le cas des grands nombres de Schmidt $Sc \gg 1$ où le spectre de la variance représenté sur la figure 1.4(b) de scalaire a une forme plus complexe. Dans la partie décroissante en $k^{-5/3}$, le scalaire est en régime **inertiel-convectif** et son spectre s'exprime toujours avec la même expression (1.24). Les grandes structures de scalaire sont brisées sous l'action inertielle du champ de vitesse tandis que la diffusion moléculaire n'a que très peu d'influence à ces échelles. Dans la partie des nombres d'onde $k > k_\eta$, le régime est **visqueux-convectif** et il est caractérisé par

un spectre en k^{-1} prédit par Batchelor [8] dont l'expression est :

$$E_\theta(k) \approx \epsilon_\theta \nu^{1/3} \epsilon^{-1/3} k^{-1} \quad Sc \gg 1. \quad (1.26)$$

Dans ce régime, les mécanismes de mélange sont dominés par les effets convectifs des écoulements laminaires jusqu'à ce que les structures de scalaire deviennent fortement influencées par la diffusion moléculaire. Dès lors, elles se diviseront jusqu'à devenir de la taille de l'échelle de Batchelor l_B .

La théorie d'Obukhov-Corrsin du mélange turbulent atteint ses limites hors turbulence de grille sûrement à cause des phénomènes anisotropes du scalaire aux petites échelles. Il semblerait que le scalaire connaisse une lente transition vers l'isotropie. Cette intermittence persiste même avec un champ de vitesse gaussien [42]. Alors que Corrsin et Obukhov développent leur théorie pour le scalaire passif, Kolmogorov, au même moment corrige sa première théorie [41] pour prendre en compte l'intermittence des fluctuations de vitesse en proposant l'hypothèse de la loi log-normale [40].

Le phénomène d'intermittence des petites échelles en THI est la conséquence du processus d'étirement des filaments tourbillonnaires [50]. L'intermittence mène en particulier à la formation des tourbillons cohérents longs. Ainsi, dans une THI, les fluctuations de vitesse ne sont pas distribuées uniformément dans l'espace. Cette hypothèse de tourbillons n'est pas incompatible avec l'hypothèse d'homogénéité qui est une propriété moyennée de l'écoulement. La dissipation locale de l'énergie cinétique $2\nu\partial u_i/\partial x_j\partial u_i/\partial x_j$ a alors d'importantes fluctuations par rapport à sa valeur moyenne.

1.2 La simulation d'écoulements turbulents

La phénoménologie de la turbulence du mélange dans un écoulement turbulent a été abordée dans les paragraphes précédents. Ils nous ont permis de mettre en avant le caractère multi-échelles de la turbulence, du mélange de scalaire et l'action "catalytique" de la turbulence sur le mélange. Nous allons maintenant décrire les méthodes de résolutions numériques employées pour étudier le mélange d'un scalaire passif.

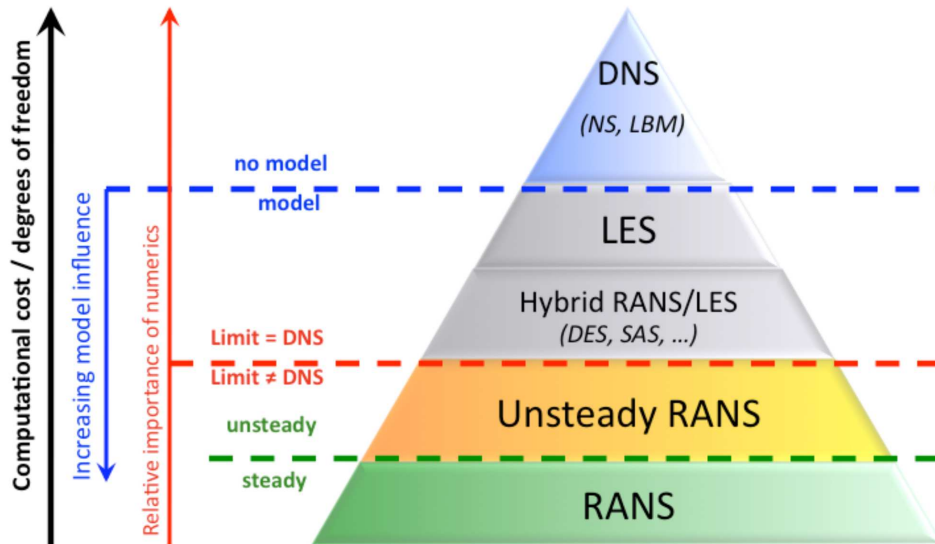


FIGURE 1.5 – Hiérarchisation des méthodes de résolution d'équations traduisant des phénomènes spatio-temporels [81].

La résolution numérique du problème de mélange impose de résoudre les équations de Navier-Stokes (1.1) et du transport du scalaire (1.17). Il existe plusieurs méthodes de résolution pour ces équations qui sont hiérarchisées sur la figure (1.5). En haut de cette pyramide se trouve la Simulation Numérique Directe (SND) qui est une méthode de résolution complète des équations. Comme vu dans les paragraphes précédents la simulation du mélange d'un scalaire passif de Schmidt moléculaire avoisinant 1 à

des nombres de Reynolds même modérés comporte une large gamme d'échelles à résoudre. Elle s'étend de l'échelle intégrale l_{int} à l'échelle de Kolmogorov l_η . Ainsi, la complexité d'une SND 3D est de l'ordre de

$$\frac{T_{int}}{\tau_\eta} \times \frac{l_{int}}{l_\eta} \sim Re^{1/2} \times Re^{9/4} = Re^{11/4}, \quad (1.27)$$

avec T_{int} le temps de retournement des tourbillons à l'échelle intégrale. D'un point de vue industriel, si on considère par exemple l'écoulement d'une voiture dans de l'air initialement au repos et se déplaçant à environ 100 km.h^{-1} , le nombre de Reynolds à l'échelle intégrale est de l'ordre de $Re_{l_{int}} \approx 7 \times 10^6$, ce qui demanderait environ 5×10^{13} points de grille à résoudre sur environ 2600 pas de temps pour ne simuler qu'un seul retournement des plus grands tourbillons. Dans le tableau 1.1, Spalart [87] fait une table prévisionnelle de la mise à disposition d'un tel calcul en se basant sur la loi d'évolution de l'accroissement des puissances de calcul de Moore². En confrontant ces prévisions et la demande en ressource (configuration de la voiture), Spalart ne prévoit pas une utilisation industrielle de la SND d'écoulements à très haut Reynolds avant la fin du 21e siècle.

Type de modélisation	Dépendance en Reynolds	Cellules	Pas de temps	Disponibilité
URANS	faible	10^7	10^3	1985
SGE	moyenne	$10^{11.5}$	$10^{6.7}$	2045
QSND	forte	10^{15}	$10^{7.3}$	2070
SND	forte	10^{16}	$10^{7.7}$	2080

TABLE 1.1 – Projections prévisionnelles des capacités informatiques pour résoudre un problème d'aérodynamique externe à haut nombre de Reynolds avec différentes méthodes de résolution selon Spalart [87]. Dans sa notation, SGE est une simulation des grandes échelles avec des lois de parois et QSND est une SGE avec un maillage très fin, sans loi de paroi où la part de modélisation est faible.

Afin de lever ces limitations, d'autres approches ont été proposées. Ces approches consistent à ne résoudre qu'une partie de l'écoulement. Ainsi, la méthode RANS (pour "Reynolds-Averaged Navier-Stokes") et sa déclinaison instationnaire URANS (pour "Unsteady RANS") proposent de ne simuler explicitement que les champs moyens de l'écoulement en s'appuyant sur la décomposition de Reynolds des champs instantanés. L'influence des champs fluctuants issus de la décomposition de Reynolds sont alors prise en compte à travers des modèles. Ce type de modélisation est peu coûteux mais il impose une bonne connaissance *a priori* de la solution, car les modèles RANS ne sont pas universels et dépendent donc de la configuration de l'écoulement. De plus, les approches RANS et URANS ne fournissent qu'une information statistique de l'écoulement contrairement à l'approche SND qui donne accès à une information spatio-temporelle riche.

Entre ces deux approches, il existe désormais des stratégies effectuant des compromis entre la complexité de modélisation et le coût de calcul comme le schématise la pyramide de la figure 1.5. La terminologie "méthodes hybrides" regroupe ainsi un vaste nombre de méthodes s'appuyant en partie sur des dérivations ou améliorations de méthodes RANS. La méthode SAS pour "Scale Adaptative Simulation" adapte le modèle de turbulence RANS en fonction de la taille de la grille de résolution pour résoudre une part des fluctuations présentes dans l'écoulement tandis que la méthode DES pour "Detached Eddy Simulation" est une modélisation de type interface qui délimite des zones de l'écoulement résolues avec des méthodes RANS (proche paroi ou écoulement quasi-stationnaire) et celles résolues avec la Simulation des Grandes Echelle (SGE) (zone d'écoulement tridimensionnel) [22].

Enfin, la SGE qui fera l'objet de ce manuscrit constitue une stratégie de simulation à part entière. Elle est la méthode la plus riche en information sur l'écoulement, après la SND, mais aussi la méthode

2. Cette loi vérifiée depuis les années 70 stipule que le nombre de transistors dans les unités de calcul double environ tous les deux ans ce qui permet de prédire l'augmentation du nombre d'opérations par seconde.

de résolution avec modélisation de la turbulence la plus coûteuse en ressource comme le schématise la figure 1.5. Avec l'accroissement des puissances de calcul, la SGE commence désormais à être applicable à des écoulements industriels [26, 69, 62].

1.2.1 Simulation des grandes échelles

La SGE repose sur l'idée de l'universalité des petites échelles des écoulements à haut nombre de Reynolds et de leur décorrélation avec les échelles macroscopiques responsables des principaux transferts. Par conséquent, le principe de la SGE est de résoudre toutes les échelles de l'écoulement jusqu'à une certaine longueur de coupure $\bar{\Delta} = \pi/k_c$ où k_c représente la norme du vecteur d'onde de coupure dans l'espace spectral. En deçà de celle-ci, les structures tourbillonnaires seront modélisées comme le schématise la figure 1.6.

Les grands tourbillons, *i.e.* ceux dont l'étendue spatiale est telle qu'ils peuvent être capturés par la grille de discrétisation³, sont directement résolus et seule l'influence des petites structures doit être modélisée.

La stratégie de SGE est similaire à celle d'une SND sous-résolue puisque le maillage n'est pas suffisamment fin pour simuler les plus petites échelles du scalaire l_B et de la vitesse l_η . Cette sous-résolution se retranscrit formellement par une opération de filtrage. Cette opération de filtrage est le plus souvent implicite, induite d'une part par la sous-discrétisation spatio-temporelle et d'autre part par les méthodes numériques utilisées pour résoudre les équations. Dans ces travaux, à l'exception de quelques simulations, les SGE seront soumises au filtrage implicite spatio-temporel et aux méthodes numériques de type spectrales dont le filtre explicite est très bien connu.

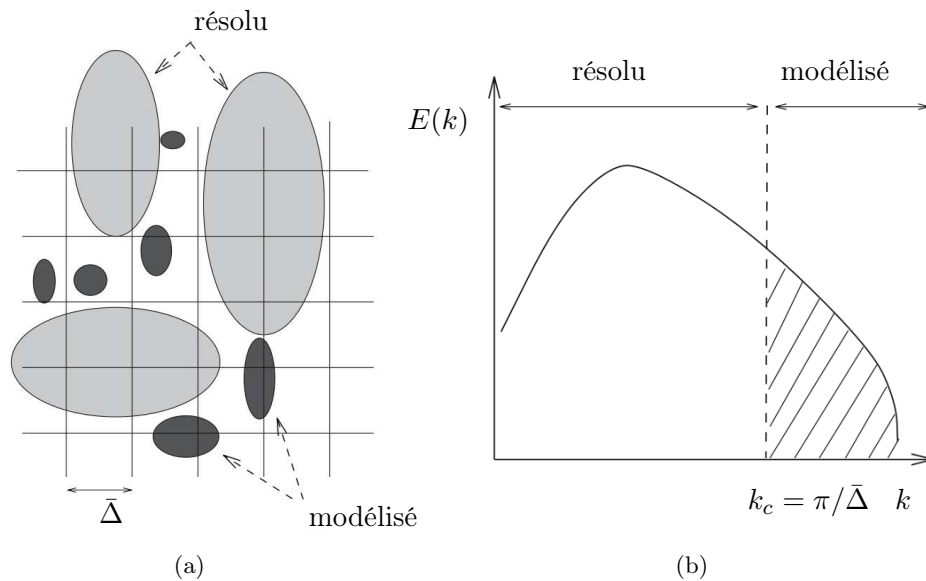


FIGURE 1.6 – Schéma représentatif des structures résolues et modélisées dans l'espace physique (a) et la fonction de densité d'énergie de ces mêmes parties dans l'espace de Fourier (b).

Leonard [31] donne la première définition rigoureuse du champ explicitement résolu en définissant un produit de convolution du signal spatio-temporel de la vitesse $u_i(\mathbf{x}, t)$ avec un filtre G^* tel que :

$$\bar{u}_i(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} G^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t') u_i(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x}' dt', \quad (1.28)$$

où \bar{u}_i représente la partie résolue du champ de vitesse complet. Cette relation montre que la stratégie de la SGE résumée dans la figure 1.6 revient à effectuer un filtrage spatial de longueur de coupure l_c

³. Le théorème de Nyquist-Shannon stipule qu'il faut une fréquence d'échantillonnage au moins deux fois supérieure à la plus haute fréquence du champ à résoudre

mais également un filtrage temporel de fréquence de coupure τ_c sur le signal de vitesse de l'écoulement. Ce double filtrage passe bas en fréquence est défini dans le filtre G^* du produit de convolution (1.28) et sert de point de départ à la formalisation mathématique de la SGE. Dans ces travaux, nous ne considérerons pas la partie temporelle du filtrage qui est par ailleurs implicitement induite par le filtrage spatial. Dorénavant, le filtre sera noté G et le produit de convolution de l'expression (1.28) sur un champ scalaire θ ou vectoriel \mathbf{u} à un instant donné sera noté

$$\bar{\theta} = G * \theta \quad \text{ou} \quad \bar{\mathbf{u}} = G * \mathbf{u}. \quad (1.29)$$

Enfin, le champ résiduel de ce filtrage est noté $u_i'' = u_i - \bar{u}_i$ et constitue la partie sous-maille du champ filtré.

Afin que le filtre G puisse s'appliquer au système d'équations de Navier-Stokes, il doit respecter les propriétés fondamentales suivantes :

— permutation avec les dérivées partielles :

$$\overline{\frac{\partial u_i}{\partial x}} = \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x} \quad \text{et} \quad \overline{\frac{\partial u_i}{\partial t}} = \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} \quad (1.30)$$

— linéarité :

$$\overline{C(u_1 + u_2)} = C\bar{u}_1 + C\bar{u}_2 \quad (1.31)$$

Ces propriétés pourraient être celles d'un opérateur de Reynolds tel qu'utilisé dans l'approche RANS. Cependant, le filtre $\bar{\cdot}$ n'est en général pas idempotent

$$\bar{\bar{u}} \neq \bar{u}, \quad (1.32)$$

et ainsi la partie résiduelle du signal par le filtre G n'est pas nulle par le produit de convolution $*$ avec le filtre G tel que

$$\overline{\bar{u} - u} \neq 0 \quad (1.33)$$

Cette dernière propriété différencie l'opérateur de filtrage de la stratégie SGE et l'opérateur de Reynolds de la stratégie RANS.

Filtres classiques de la SGE

Dans les filtres couramment cités, notons les filtres boîte, coupure spectrale et gaussien. Les filtres boîte et coupure spectrale ont des comportements opposés selon l'espace dans lequel ils sont représentés. Le filtre boîte monodimensionnel

$$G(x - x') \begin{cases} \frac{1}{\Delta} & \text{si } |x - x'| < \frac{\Delta}{2} \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases} \quad (1.34)$$

représente un filtrage par la moyenne des valeurs spatialement voisines du point à filtrer. A l'inverse, le filtre de coupure spectrale annule les nombres d'onde au dessus de la valeur de coupure k_c :

$$\check{G}(k) \begin{cases} 1 & \text{si } k < k_c \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (1.35)$$

Le filtre boîte dans l'espace physique et le filtre coupure spectrale dans l'espace de Fourier sont tous les deux locaux alors que leurs expressions dans l'espace qui leur est complémentaire :

$$\check{G}(k) = \text{sinc}\left(\frac{k\bar{\Delta}}{2}\right), \quad (1.36)$$

pour le filtre boîte dans l'espace spectral, où *sinc* est le sinus cardinal, et

$$G(x - x') = \text{sinc} \left(\frac{\pi(x - x')}{\Delta} \right), \quad (1.37)$$

pour le filtre coupure spectrale dans l'espace physique, sont des opérations non locales sur les champs à filtrer. On notera que le filtre de coupure spectrale est idempotent et qu'il n'est pas inversible. De plus, il n'est pas défini positif à l'inverse des filtres boîte et gaussien. Cette propriété de filtre défini positif est nécessaire pour assurer une énergie cinétique sous-maille ou une variance sous-maille qui soit bien définie positive [93].

Le filtre de coupure spectrale sera exclusivement utilisé dans ces travaux puisqu'il émule les méthodes numériques de type spectral utilisées dans ce mémoire pour réaliser les opérations de dérivation spatiale. Le filtre boîte émule exactement le filtrage implicite des opérateurs de dérivation spatiale discrétisés par des méthodes numériques volumes finis centrées d'ordre 2 [77, 85].

Comme le filtre boîte, le filtre gaussien est un filtre inversible et défini positif. Cependant il est non local dans les espaces physiques

$$G(x - x') = \frac{\sqrt{6}}{\pi \Delta^2} \exp \left(-\frac{6|x - x'|}{\Delta^2} \right), \quad (1.38)$$

et non local dans l'espace spectral

$$\check{G}(k) = \exp \left(\frac{-\Delta^2 k^2}{24} \right). \quad (1.39)$$

Equations d'évolution filtrées de la SGE

La SGE est donc une méthode de résolution qui revient formellement à un filtrage du système d'équations résolus pour prédire le mélange d'un scalaire dans un écoulement turbulent, Eqs. (1.1) et (1.17). L'application du filtrage aux équations du champ de vitesse fournit les équations dites filtrées :

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1.40)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 \bar{u}_i}{\partial x_j^2} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad (1.41)$$

avec

$$\tau_{ij} = C_{ij} + R_{ij} + L_{ij} = \overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j. \quad (1.42)$$

où $C_{ij} = \overline{u_i u_j''} - \overline{u_i'' u_j}$ est le tenseur des interactions croisées entre les échelles résolues et modélisées, $R_{ij} = \overline{u_i'' u_j''}$ est le tenseur de Reynolds qui représente les interactions des petites échelles entre elles, et $L_{ij} = \overline{u_i \bar{u}_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j$ le tenseur de Leonard qui représente l'interaction des grandes échelles entre elles. Cette décomposition triple ou de Leonard [31] peut aussi être obtenue directement depuis l'équation de quantité de mouvement. Le filtrage de l'équation de champ de scalaire

$$\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} + \bar{u}_i \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i} = \frac{\nu}{Sc} \frac{\partial^2 \bar{\theta}}{\partial x_i^2} - \frac{\partial \tau_i}{\partial x_i} \quad (1.43)$$

avec

$$\tau_i = L_i + C_i + R_i = \overline{u_i \bar{\theta}} - \bar{u}_i \bar{\theta}, \quad (1.44)$$

où les termes $L_i = \overline{u_i \bar{\theta}} - \bar{u}_i \bar{\theta}$, $C_i = \overline{u_i'' \bar{\theta}} - \overline{u_i \bar{\theta}''}$ et $R_i = \overline{u_i'' \bar{\theta}''}$ ont des rôles similaires aux termes de la décomposition (1.42). Les nouveaux termes des équations filtrées (1.44), (1.42) doivent être pris en compte dans la résolution des équations. Ils doivent être modélisés car les variables dont ils dépendent ne sont pas accessibles au cours d'un calcul de SGE.

Dans le cas où la décomposition SGE, Eq. (1.29), devient $u'' = 0$, soit $G = 1$ dans le produit de convolution, alors les termes sous-maille tendent vers 0 et les champs résolus tendent vers leurs signaux complets. Par conséquent, la stratégie SGE a un comportement asymptotique tendant vers la SND lorsque la grille de résolution devient assez fine pour résoudre jusqu'à l'échelle de Kolmogorov l_η .

Un des enjeux de la SGE [73, 46] est donc de proposer des modèles fiables pour prédire les termes, τ_{ij} et τ_i . Ces modèles sont communément appelés modèles sous-maille. La construction de modèles sous-maille doit respecter au préalable un certain nombre de critères comme la conservation de l'invariance Galiléenne des équations de Navier-Stokes ou la minimisation de l'influence sur les échelles résolues pour ne pas impacter la dynamique des macro-échelles. D'un point de vue technique, compte tenu du coût déjà important de la SGE, le modèle sous-maille doit être le plus local possible en espace⁴ et en temps. Il se doit également d'être algorithmiquement peu complexe pour cette même raison.

Les modèles doivent reproduire les termes sous-maille (1.42) et (1.44) et respecter les transferts d'énergie entre les échelles modélisées et les échelles résolues. Nous verrons que ces deux propriétés ne sont pas nécessairement respectées simultanément [80] et les modèles présentés dans ce mémoire cherchent à les regrouper. Par exemple, dans le cas du scalaire passif, l'équation de la variance de scalaire résolu $\bar{\theta}^2/2$ obtenue en multipliant (1.43) par $2\bar{\theta}$:

$$\frac{\partial \bar{\theta}^2}{\partial t} + \bar{u}_i \frac{\partial \bar{\theta}^2}{\partial x_i} = \kappa \frac{\partial^2 \bar{\theta}^2}{\partial x_i^2} - 2\kappa \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i} - \underbrace{\bar{\theta} \frac{\partial \tau_i}{\partial x_i}}_{-T_{SGS}} \quad (1.45)$$

et l'équation de la variance de scalaire sous-maille $V_{SGS} = 1/2(\overline{\theta\theta} - \bar{\theta}\bar{\theta})$:

$$\frac{\partial V_{SGS}}{\partial t} + \bar{u}_i \frac{\partial V_{SGS}}{\partial x_i} = \kappa \frac{\partial^2 V_{SGS}}{\partial x_i^2} - \kappa \left(\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i} - \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{\theta\theta u_i} - \bar{u}_i \bar{\theta}\bar{\theta}) + \underbrace{\bar{\theta} \frac{\partial \tau_i}{\partial x_i}}_{+T_{SGS}}. \quad (1.46)$$

caractérisent les échanges énergétiques du scalaire. Les mécanismes d'échange inter-échelles sont couplés par le terme T_{SGS} qui apparaît dans les deux équations précédentes avec un signe opposé. Dans le cas de transfert de variance des échelles résolues vers les échelles sous-maille, ce terme est positif, ce qui représente un puits dans la partie résolue (1.45) et une source dans la partie modélisée (1.46). De telles équations d'échange énergétique peuvent également être établies pour la vitesse. L'équation de l'énergie cinétique résolue est obtenue en multipliant l'équation de transport de quantité de mouvement par \bar{u}_i :

$$\frac{1}{2} \frac{\partial \bar{u}_i \bar{u}_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(-\frac{\bar{u}_i \bar{p}}{\rho} + \frac{\nu}{2} \frac{\partial \bar{u}_i \bar{u}_i}{\partial x_j} - \tau_{ij} \bar{S}_{ij} \right) - \nu \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \underbrace{\tau_{ij} \bar{S}_{ij}}_{F_{SGS}}, \quad (1.47)$$

et l'équation de l'évolution de l'énergie cinétique sous-maille $\tau_{ii} = \overline{u_i^2} - \bar{u}_i^2$:

$$\frac{1}{2} \frac{\partial \tau_{ii}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(-\frac{1}{\rho} (\overline{u_i p} - \bar{u}_i \bar{p}) + \frac{\nu}{2} \frac{\partial \tau_{ii}}{\partial x_j} + \tau_{ij} \bar{S}_{ij} \right) - \nu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right) - \underbrace{\tau_{ij} \bar{S}_{ij}}_{-F_{SGS}}. \quad (1.48)$$

Le terme F_{SGS} est le terme d'échange entre l'énergie cinétique résolue et l'énergie cinétique sous-maille. Si F_{SGS} est négatif alors le transfert sous-maille est direct des échelles résolues vers les échelles modélisées (forwardscatter) et inverse dans le cas inverse (backscatter).

La description des échanges énergétiques est une question délicate, puisqu'elle n'est pas locale dans l'espace de Fourier malgré la coupure opérée par l'opération de filtrage implicite de la SGE. Dans les cas du scalaire et de la vitesse, ces échanges sont majoritairement des grandes vers les petites échelles conformément à la notion de cascade d'énergie évoquée en début de ce chapitre. Cependant,

4. cette condition n'est jamais respectée dans un code spectral si le modèle fait intervenir une dérivé spatiale

des transferts inverses, des petites vers les grandes échelles, existent localement.

1.2.2 Modèles de sous-maille

La présentation des modèles sous-maille va largement s'appuyer sur la classification proposée par Sagaut [80] qui classe les modèles en deux catégories : les modèles fonctionnels et les modèles structurels. Tous les modèles sous-maille ne sont pas regroupés dans ces deux catégories mais cette distinction est profondément inscrite dans les modèles développés dans ce mémoire. Un rapide aperçu des caractéristiques des modèles structurels et fonctionnels est proposé, sans chercher à fournir une liste exhaustive des nombreux modèles sous-maille qui ont pu être proposés dans la littérature. Le lecteur pourra se référer à l'ouvrage [80] pour plus de détails.

Modèles fonctionnels

Ce paradigme de modélisation cherche à **reproduire les transferts énergétiques entre les échelles résolues et les échelles modélisées**. L'étude de ces interactions énergétiques montre

- une prédominance du drainage de l'énergie des échelles résolues vers les échelles modélisées : transfert direct ou "forwardscatter" devant la remontée d'énergie des échelles modélisées vers les échelles résolues : transfert indirect ou "backscatter".
- les transferts énergétiques dépendent de la forme du spectre d'énergie cinétique et du type de filtre de coupure. Ici, nous utiliserons exclusivement le filtre de coupure spectrale.
- dans le cas des modèles sous-maille pour l'équation de transport de la quantité de mouvement filtrée, ce sont les champs de vitesse et de vorticité qui sont responsables de ces transferts.

Nous nous intéresserons aux modèles sous-maille de type fonctionnel ne modélisant que le transfert direct d'énergie via la construction explicite de modèles algébriques. Cette modélisation classique sera formellement utilisée avec les modèles de type Smagorinsky [86] définis un peu plus loin. Le rôle du modèle sous-maille fonctionnel peut aussi être obtenu par l'utilisation de méthodes numériques dont les erreurs de troncature reproduisent les effets dissipatifs du transfert direct (ILES pour "Implicit Large Eddy Simulation").

Des modèles explicites s'appuient sur l'hypothèse d'équilibre énergétique induit par la séparation d'échelles dans l'espace spectral. Parmi ceux-ci, les modèles spectraux se basent sur des expressions du spectre de l'énergie cinétique et sur l'échelle de coupure implicite de la SGE. A partir de ces informations est calculée une viscosité effective permettant d'évaluer un terme sous-maille. Ces modèles sont principalement issus des travaux de Kraichnan et de l'EDQNM [50] et ils s'appliquent exclusivement à des codes de calcul utilisant des méthodes numériques spectrales ou pseudo-spectrales.

Une autre partie des modèles fonctionnels explicites se basent sur l'hypothèse de viscosité sous-maille. Dans l'espace physique, ce mécanisme de transfert direct d'énergie a pour objectif d'être similaire à un mécanisme de diffusion piloté par une viscosité artificielle dont une formulation algébrique est donnée par Boussinesq dans l'expression du tenseur pour la vitesse :

$$\tau_{ij} = -2\nu_{SGS}\bar{S}_{ij} + \frac{1}{3}\tau_{kk}\delta_{ij}. \quad (1.49)$$

En incompressible, la trace du tenseur sous maille utilisée dans l'expression précédente est ajoutée au terme de pression \bar{p} de l'expression (1.41) qui devient $\bar{p} + \frac{1}{3}\tau_{kk}\delta_{ij}$. Se baser sur une telle expression implique de considérer qu'il y a une séparation totale entre les échelles résolues et les échelles modélisées et que cette viscosité sous-maille dépend d'une longueur et d'un temps caractéristique qu'il faut définir localement pour aboutir à un modèle. L'expression du tenseur sous-maille (1.49) contraint l'alignement des vecteurs propres du tenseur sous-maille avec ceux du tenseur des déformations filtrées. Plusieurs auteurs comme Horiuti [37] pour le tenseur sous-maille de la vitesse et Chumakov [12] pour le vecteur sous-maille du scalaire ont montré que cette colinéarité n'existait pas. Cela confirme que les modèles fonctionnels à viscosité sous-maille n'ont pas pour but de reproduire le tenseur sous-maille directement, mais les effets de ce tenseur sur les transferts.

Les modèles basés sur la viscosité sous-maille sont partagés en trois types :

- les premiers sont les modèles basés sur le champ résolu complet. Les modèles de Smagorinsky [86] font partie de cette classe et nous verrons au cours de ces travaux les différentes déclinaisons de ce modèle. A l'origine, le modèle de Smagorinsky [86] a pour expression :
 - dans le cas du vecteur sous-maille du scalaire :

$$\tau_i = C\bar{\Delta}^2|\bar{S}|\frac{\partial\bar{\theta}}{\partial x_i}, \quad (1.50)$$

- dans le cas du tenseur sous-maille de la vitesse :

$$\tau_{ij} = C\bar{\Delta}^2|\bar{S}|\frac{\partial\bar{u}_i}{\partial x_j}, \quad (1.51)$$

où $\bar{\Delta}$ est la longueur de coupure, $|\bar{S}| = \sqrt{2\bar{S}_{ij}\bar{S}_{ij}}$ est la norme du tenseur des déformations filtrées et C une constante à déterminer selon le type d'écoulement à simuler. Dans le cas d'une THI et pour le champ de vitesse filtré Métais & Lesieur [56] déterminent que $C = -(0.18)^2$. La déclinaison dynamique de ce modèle a été proposée par Germano *et al.* [33] puis améliorée par Lilly [51] où le coefficient dynamique C s'écrit dans le cas du modèle pour la vitesse :

$$C = \frac{\langle L_{ij}M_{ij} \rangle}{\langle M_{ij}M_{ij} \rangle} \quad \text{avec} \quad M_{ij} = \hat{\Delta}^2|\hat{S}|\hat{S}_{ij} - \overline{\hat{\Delta}^2|\hat{S}|\hat{S}_{ij}} \quad \text{et} \quad L_{ij} = \overline{\hat{u}_i\hat{u}_j} - \hat{u}_i\hat{u}_j. \quad (1.52)$$

et dans le cas du modèle pour le scalaire [57] :

$$C = \frac{\langle L_iM_i \rangle}{\langle M_iM_i \rangle} \quad \text{avec} \quad M_i = \hat{\Delta}^2|\hat{S}|\frac{\partial\hat{\theta}}{\partial x_i} - \overline{\hat{\Delta}^2|\hat{S}|\frac{\partial\hat{\theta}}{\partial x_i}} \quad \text{et} \quad L_i = \overline{\hat{u}_i\hat{\theta}} - \hat{u}_i\hat{\theta}. \quad (1.53)$$

Dans les prochains chapitres, les modèles de cette famille seront notés *DSM* (pour "Dynamic Smagorinsky Model") ou *DEDM* (pour "Dynamic Eddy Diffusivity Model") dans le cas spécifique des modèles sous-maille pour le scalaire.

- les modèles s'appuyant seulement sur les grandeurs des plus hautes fréquences des champs résolus, *i.e.* celles au voisinage de la fréquence de coupure dans l'espace spectral. Ces modèles se basent sur une hypothèse d'équilibre énergétique au voisinage de la longueur de coupure. Cela se traduit formellement par l'existence d'un transfert si l'énergie est strictement positive à l'échelle de coupure.
- les modèles dérivant une viscosité sous-maille directement depuis les grandeurs de sous-maille. Ces derniers modèles, de par leur interaction directe avec les quantités de sous-maille⁵ permettent de lever l'hypothèse d'équilibre énergétique à l'échelle de coupure. Cette particularité rend ces modèles plus performants dans la reproduction des échanges.

Tous ces modèles affichent des résultats satisfaisants dans des simulations de THI avec une longueur de coupure assez haute dans le spectre d'énergie, soit environ 80% de l'énergie totale résolue dans la SGE [72]. Des améliorations ont été apportées dès lors que l'écoulement simulé a des zones anisotropes ou de transition. Parmi ces techniques d'amélioration, notons le calcul d'un coefficient dynamique basé sur le calcul de grandeurs à une échelle de filtrage test $\tilde{\Delta} = 2\bar{\Delta}$ [33] ou encore une technique d'accentuation des hautes fréquences des échelles résolues [24]. Ces techniques seront utilisées dans le chapitre 3 de ce mémoire.

La classe des modèles fonctionnels à viscosité sous-maille comprend également une famille de modèles déterministes modélisant le transfert inverse d'énergie et des modèles stochastiques basés sur l'ajout d'un forçage [80].

En résumé, l'hypothèse essentielle motivant le développement de modèles fonctionnels est que l'interaction entre les échelles résolues et les échelles modélisées est principalement de type énergétique. Par conséquent, la modélisation du transfert énergétique entre ces deux gammes d'échelles, suffit à modéliser l'influence des échelles sous-maille sur les échelles résolues. Ce transfert bi-directionnel se

5. représentées par la résolution d'équation de grandeurs de sous-maille supplémentaires

compose en une large part de transfert des échelles résolues vers les échelles modélisées (transfert direct) et dans une moindre mesure, d'un transfert des échelles modélisées vers les échelles résolues (transfert indirect).

Modèles structurels

Les modèles sous-maille de **type structurel** ont pour but de **reproduire** le plus fidèlement possible les **composantes des termes sous-maille**. Ils peuvent ainsi fournir des informations sur la structure de la turbulence de sous-maille ou sur les structures de scalaire de sous-maille. Leurs méthodes de construction diffèrent des modèles fonctionnels en se basant sur des principes de développement mathématique.

- La première classe de modèles s'appuie sur des décompositions formelles des termes filtrés. Parmi eux, les modèles de déconvolution ne nécessitent aucune information *a priori*. Ces modèles cherchent à reconstruire la partie sous-maille du champ de SGE (déconvolution forte) par le calcul de la bijection du filtre implicite supposé être utilisé. Seul les filtres inversibles tel que le filtre boîte ou gaussien permettent de reconstruire une partie du champ de sous-maille (déconvolution faible). L'inversion du filtre G s'effectue par la connaissance de sa forme analytique, ce qui permet d'écrire son développement en série de Taylor tronqué à l'ordre N :

$$G(x) = \sum_{k=0}^N \frac{(-1)^k}{k!} \bar{\Delta}^k M_k(x) \frac{\partial^k G}{\partial x^k}(x) + O(\bar{\Delta}^N), \quad (1.54)$$

avec $\bar{\Delta}$ la longueur de coupure implicite et $M_k(x)$ les moments statistiques d'ordre k du filtre G ⁶. Ainsi, $G * G^{-1} = Id + o(\bar{\Delta}^N)$

- Dans un autre registre, les développements en série de Taylor des filtres des SGE sont appliqués aux champs de vitesse et de scalaire pour reconstruire les composantes des tenseur et vecteur sous-maille. Cette méthode de construction aboutit au modèle du gradient introduit par Leonard [31] et repris par Clark *et al.* [13] qui sera le point de départ du développement de nouveaux modèles dans le chapitre 3. Les expressions des modèles du gradient développés avec les filtres boîte et gaussien sont :
 - pour le vecteur sous-maille du scalaire :

$$\tau_i = \frac{\bar{\Delta}^2}{12} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_j} \quad (1.55)$$

- pour le tenseur sous-maille de la vitesse :

$$\tau_{ij} = \frac{\bar{\Delta}^2}{12} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_k} \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_k}. \quad (1.56)$$

Cette famille de modèles sera notée *GM* (pour "Gradient Model") dans les prochains chapitres.

- Les modèles non linéaires utilisant des décompositions tensorielles et vectorielles des vecteurs et tenseurs sous-maille à modéliser. Ces modèles utilisent la théorie des bases d'intégrité et seront utilisés dans la partie 5 de ces travaux [88, 67].
- Les modèles de similarité d'échelle sont construits sur différents niveaux de filtrage parmi les échelles résolues. Le modèle de similarité d'échelle de Bardina *et al.* [6] a motivé la construction des modèles mixtes opérant la combinaison linéaire de modèles fonctionnels et structurels. Le modèle de Clark [13] en est un exemple et sera utilisé dans le chapitre 4 à la section 4.2.1.
- Des outils de mathématiques appliquées tels que les réseaux de neurones commencent à être utilisés. La procédure d'utilisation impose de connaître *a priori* une solution exacte comme nous le verrons dans les chapitres 4 et 5 ou une solution issue d'une SGE connue [83]. L'estimateur optimal introduit par Moreau *et al.* [59] dans le domaine de la SGE sera introduit pour permettre de construire de nouveaux modèles

6. Les moments statistiques du filtre de coupure spectrale sont des intégrales impropres non convergentes. Il n'y a donc pas de développement possible de ce filtre.

1.2.3 Comparaison des modèles structurels et fonctionnels

Les modèles de type fonctionnel modélisent le transfert d'énergie à travers l'échelle de coupure de la SGE. Ils ont pour inconvénient d'être faiblement corrélés au terme sous-maille exact car ils contraignent les composantes du tenseur des contraintes de déformation à être alignées avec celles du tenseur sous-maille exact ce qui n'est pas généralement le cas [37]. Les modèles de type Smagorinsky [86] ne dérogent pas à la règle car ils sous-estiment largement les fluctuations des grandeurs dont ils modélisent la partie de sous-maille et cette sur-dissipation, dans le cas du modèle de Smagorinsky original, conduit, par exemple, à une mauvaise prédiction de transition vers la turbulence [95].

Les modèles structurels modélisent le plus souvent chacune des composantes des vecteurs et tenseurs sous-maille en ne faisant aucune hypothèse sur la forme fonctionnelle générale du modèle comme peuvent le faire les modèles fonctionnels se basant sur l'hypothèse d'une viscosité sous-maille par exemple. Les modèles structurels cherchent à être corrélés au terme sous-maille exact mais ils ne reproduisent pas correctement les transferts sous-maille ce qui les conduit à produire des simulations instables ce que nous retrouvons dans l'exemple du modèle du gradient. En effet, comme tout modèle structurel, le modèle du gradient a de bonnes corrélations avec le tenseur sous-maille exact. Cependant, ce modèle est instable dans la pratique à cause du transfert inverse d'énergie cinétique sous-maille qu'il effectue, comme le montre Love [54]. Vreman *et al.* [94] ont montré sur l'équation de Burgers 1D que l'ajout du modèle du gradient est responsable de l'apparition d'instabilités dans les modes élevés de l'écoulement. Ces instabilités sont caractéristiques du transfert inverse d'énergie cinétique modélisée vers les petites échelles résolues. Des corrections ont été proposées comme celle de Liu *et al.* [52] qui introduisent un limiteur coupant brutalement le modèle dans les zones où il effectue du transfert inverse.

Une hiérarchie entre les deux familles de modèles semble exister car il est envisageable qu'un modèle structurel reproduisant fidèlement le terme sous-maille exact puisse également reproduire les transferts énergétiques entre les échelles résolues et les échelles modélisées. Les modèles sous-maille structurels sont donc en théorie les meilleurs candidats pour permettre une résolution fine des plus petites structures de la turbulence résolue.

Dans ce mémoire nous cherchons à construire de nouveaux modèles sous-maille qui se baseront naturellement sur des modèles sous-maille structurels issus des familles :

- basées sur le développement en série de Taylor du terme sous-maille exact.
- non linéaires et issues de la théorie des bases d'intégrité.
- utilisant les outils de mathématiques appliquées : les réseaux de neurones, l'optimisation multi-objectifs et l'estimateur optimal.

En résumé

La problématique de la modélisation sous-maille⁷ dans le contexte de la SGE pour le mélange du scalaire passif dans les écoulements turbulents a été abordée.

La SGE conduit à de nouveaux termes dans les équations filtrées qui doivent être modélisés. Les modèles sous-maille classiques pour ce mémoire ont été présentés selon la classification fonctionnelle et structurelle [80] qui permet de caractériser les origines de leurs constructions, leurs aptitudes et leurs insuffisances.

Dans ce mémoire, nous nous proposons de construire de nouveaux modèles sous-maille se basant sur des modèles structurels. Les étapes de leurs constructions vont faire appel à des outils et des concepts que nous allons présenter dans le chapitre suivant.

7. hors de toutes considérations numériques

Chapitre 2

Méthodologie suivie pour l'analyse et le développement de modèles sous-maille

Sommaire

2.1 Performances structurelle et fonctionnelle	19
2.1.1 Performance fonctionnelle	20
2.1.2 Performance structurelle	20
2.2 Estimateur optimal et performance structurelle	20
2.2.1 Définition de l'estimateur optimal	20
2.2.2 Techniques de calcul	21
Moyenne conditionnelle d'une seule variable	21
Moyenne conditionnelle de plusieurs variables	22
2.3 Tests <i>a priori</i> et <i>a posteriori</i> d'un modèle sous-maille	24
2.4 Outils numériques : base de données SND	24
2.5 Méthodologies suivies	26

Le précédent chapitre a introduit les concepts de base de la modélisation sous-maille pour la réalisation de SGE du mélange turbulent. Il a été mis en évidence que la SGE du mélange turbulent conduit à des termes sous-maille issus du filtrage du terme d'advection de l'équation de quantité de mouvement, $\tau_{ij} = \overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j$, et du filtrage du terme de convection de l'équation de transport du scalaire passif, $\tau_i = \overline{u_i \theta} - \bar{u}_i \bar{\theta}$. Puisque ces termes sous-maille sont en partie composés de variables inaccessibles lors de la réalisation de SGE, ils doivent être modélisés pour fermer les équations.

L'objectif de ce mémoire est de présenter une méthode de diagnostic des performances des modèles sous-maille se basant sur la classification proposée par Sagaut [80] et d'évaluer la pertinence d'approches de modélisation de ces termes sous-maille utilisant des techniques issues des mathématiques encore peu exploitées en SGE. La méthodologie suivie dans la suite de ce mémoire s'appuie sur les concepts et techniques qui vont être introduits dans ce chapitre.

2.1 Définition des performances fonctionnelle et structurelle d'un modèle sous-maille

La classification des modèles sous-maille proposée par Sagaut [80] distingue les modèles sous-maille visant à reproduire globalement les transferts énergétiques entre les échelles résolues et les échelles modélisées, qui ont été qualifiés de modèles de type fonctionnel, des modèles reproduisant le plus fidèlement possible le terme sous-maille à modéliser, donc visant à reconstruire les échelles non résolues et qui ont été qualifiés de modèles structurels. Dans ce mémoire, nous proposons de nous appuyer sur cette distinction pour déterminer les performances des modèles sous-maille. Il s'agit ainsi de distinguer la performance fonctionnelle d'un modèle, de sa performance structurelle. Suivant la classification de Sagaut [80], la performance fonctionnelle vise à mesurer la capacité d'un modèle à correctement reproduire les transferts globaux d'énergie à l'échelle de coupure, alors que la performance structurelle

cherche à évaluer à quel point le modèle est une représentation locale fidèle du terme sous-maille. Des critères quantitatifs sont ainsi proposés pour mesurer ces deux performances.

2.1.1 Performance fonctionnelle

Puisque la performance fonctionnelle est la capacité d'un modèle à bien reproduire les transferts globaux d'énergie, il est naturel de s'intéresser aux termes de transferts énergétiques mis en évidence dans le couple d'équations (1.45), (1.46) pour le transfert sous-maille d'énergie cinétique résolue et dans le couple d'équations (1.47), (1.48) pour le transfert sous-maille de la variance du scalaire résolu. Globalement, ces transferts sont contrôlés par les termes dits de dissipations sous-maille, $\langle \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i} \tau_i \rangle$ et $\langle \tau_{ij} \bar{S}_{ij} \rangle$ respectivement pour le scalaire et la vitesse. Il s'agira ainsi de mesurer si le modèle conduit à une prédiction correcte de ces dissipations sous-maille. Même si les transferts globaux d'énergie sont les premiers transferts à considérer pour l'évaluation de la performance fonctionnelle d'un modèle, les transferts d'autres quantités peuvent être évalués. En particulier, dans le chapitre 3, le transfert d'entrophie sera également considéré afin de mieux caractériser le comportement aux plus petites échelles résolues des modèles [38].

2.1.2 Performance structurelle

La mesure de la performance structurelle revient donc à mesurer localement l'erreur entre le terme exact et le modèle. Différentes définitions de l'erreur peuvent être données, mais Langford & Moser [45] ont montré que l'erreur quadratique entre le terme sous-maille exact et le modèle sous-maille testé était l'erreur la plus pertinente pour quantifier cette performance. Par conséquent la performance structurelle s'évaluera sous la forme d'une moyenne volumique d'erreur quadratique¹ :

$$e_q = \langle (T - \tau)^2 \rangle \quad (2.1)$$

où dans cette expression τ est le modèle et T le terme exact. Puisqu'il s'agit plus particulièrement d'évaluer la performance du modèle à décrire localement le terme apparaissant dans les équations de la quantité de mouvement filtrée et dans l'équation du scalaire, l'erreur ne sera pas directement calculée sur le tenseur τ_{ij} (pour la vitesse) et sur le vecteur τ_i (pour le scalaire), mais sur leur divergence. L'erreur sera ainsi calculée sur le vecteur $\partial \tau_{ij} / \partial x_j$ pour la vitesse, et sur $\partial \tau_i / \partial x_i$ pour le scalaire.

2.2 Notion d'estimateur optimal au sens de la performance structurelle

2.2.1 Définition de l'estimateur optimal

Au-delà des critères d'évaluation de performance des modèles qui viennent d'être définis, en distinguant les performances fonctionnelle et structurelle, une information utile serait de pouvoir quantifier le degré d'amélioration possible d'un modèle. En particulier, si on note que la modélisation consiste à approcher un terme inconnu en combinant un certain nombre de variables connues, il est utile de savoir si l'erreur d'un modèle vient d'un mauvais choix de variables ou d'une mauvaise combinaison de ces variables entre elles. Moreau *et al.* [59] proposent une méthode de diagnostic donnant accès à ce type d'information sur la performance structurelle. En notant $\tau(\phi)$ le modèle construit à partir d'un jeu de variables ϕ , Moreau *et al.* décomposent l'erreur quadratique (2.1) en :

$$e_q = \underbrace{\langle (T - \langle T | \phi \rangle)^2 \rangle}_{e_{ir}} + \underbrace{\langle (\langle T | \phi \rangle - \tau)^2 \rangle}_{e_f \geq 0}. \quad (2.2)$$

où $\langle T | \phi \rangle$ est la moyenne conditionnée de T par le jeu de variables ϕ . Ils montrent ainsi que l'erreur quadratique e_q de l'expression (2.1) sera toujours supérieure ou égale à l'erreur quadratique construite avec l'estimateur $\langle T | \phi \rangle$ puisque $e_f \geq 0$. En d'autres termes, le meilleur modèle possible s'appuyant

1. Cette erreur quadratique est une norme L_2 afin de pouvoir la généraliser au scalaire, vecteur, tenseur...

sur le même jeu de variables ϕ que le modèle τ est $\langle T|\phi \rangle$. Moreau *et al.* [59] définissent ainsi $\langle T|\phi \rangle$ comme l'**estimateur optimal** de T pour le jeu de variables ϕ . Par conséquent, la plus petite erreur quadratique que l'on peut construire avec ϕ est atteinte avec l'estimateur optimal tel que :

$$e_q \geq \langle (T - \langle T|\phi \rangle)^2 \rangle = e_{ir}, \quad (2.3)$$

où e_{ir} est l'**erreur irréductible**. Cette décomposition d'erreur permet donc de distinguer la part due au choix de variables, ϕ , pour la modélisation (donnée par l'erreur irréductible, e_{ir}) et la part due à la fonction combinant ces variables entre elles (donnée par e_f que l'on peut qualifier d'erreur de forme fonctionnelle²).

Le calcul des termes de l'expression (2.2) va permettre différents **diagnostics structurels** sur les modèles sous-maille. Trois principaux types d'informations peuvent être déduits de cette analyse :

1. les **performances structurelles** de différents modèles peuvent être mises en concurrence en comparant leurs **erreurs quadratiques**.
2. le **jeu de variables** qui serait le **meilleur candidat** pour construire un modèle. Ce sera le jeu de variables conduisant à l'**erreur irréductible** la plus faible.
3. le **potentiel d'amélioration** d'un modèle qui est quantifié par l'**erreur de forme fonctionnelle**.

Si un modèle a une erreur quadratique bien plus grande que son erreur irréductible (donc une erreur de forme fonctionnelle élevée), une amélioration du modèle peut être espérée. A l'inverse, la performance structurelle d'un modèle ayant son erreur quadratique proche de son erreur irréductible (donc une erreur de forme fonctionnelle basse) ne pourra être améliorée qu'en modifiant le jeu de variables. Ces concepts sont largement utilisés dans les chapitres qui suivent et ils ont déjà été utilisés dans de précédents travaux [3, 4, 5, 29, 59] où le concept d'estimateur optimal a toujours été utilisé comme outil de diagnostic, dans l'esprit de la description qui vient d'être proposée. Dans le chapitre 4, nous proposons une nouvelle utilisation de l'estimateur optimal puisque nous cherchons à l'appliquer directement comme **modèle sous-maille**.

2.2.2 Techniques de calcul

Le point crucial pour les différentes utilisations que l'on souhaite faire de l'estimateur optimal réside dans le calcul de la moyenne conditionnelle pour évaluer l'estimateur optimal lui-même. Son évaluation intervient dans la phase de diagnostic des modèles et éventuellement dans la phase de "construction" du modèle sous-maille (comme ce sera le cas dans le chapitre 4). Différentes stratégies de calcul basées sur la méthode histogramme sont mises en oeuvre en fonction de l'utilisation finale de l'estimateur optimal et du nombre de variables de conditionnement. A cet effet, nous différencierons les calculs de la moyenne conditionnelle des estimateurs optimaux d'une variable et de plusieurs variables.

Moyenne conditionnelle d'une seule variable

On définit un domaine V et \vec{x} la position d'un point dans ce domaine. Soient $A(\vec{x})$ et $B(\vec{x})$ deux champs scalaires qui varient spatialement dans ce domaine. Le calcul de la moyenne conditionnée de A par une variable B peut se faire par une méthode dite histogramme consistant à discrétiser en segments uniformes la plage de variation de B . La moyenne de A conditionnée par B sera ainsi donnée par les différentes moyennes arithmétiques de A calculées sur les ensembles des points \vec{x} ayant une valeur de B incluse dans les mêmes segments. Ainsi, soit N_B , le nombre de segments de B tel que $\max(B) - \min(B) = \delta N_B$ avec δ l'amplitude des segments discrétisant la variation totale de B . On définit N_B centres de segments de la variable B tel que

$$C_B(i) = \min(B) + (2i + 1)\delta/2 \quad (2.4)$$

2. Cette appellation ne doit pas être confondue avec les modèles fonctionnels ou la performance fonctionnelle.

La technique histogramme revient à construire la fonction de densité de probabilité de B et ensuite à effectuer la moyenne pondérée de A par cette densité de probabilité de B . On définit alors un ensemble E de N_B sous-ensembles E_i tels que chaque E_i liste les coordonnées spatiales des points où la valeur $B(\vec{x})$ est incluse dans le segment i . Ainsi,

$$E_i = \{\vec{x} \mid C_B(i) - \delta/2 \leq B < C_B(i) + \delta/2\} \quad i \in \llbracket 1 : N_B \rrbracket. \quad (2.5)$$

L'ensemble E représente en quelque sorte la fonction de densité de probabilité de la variable B avec l'information spatiale de la position des valeurs. Avec ces conventions d'écriture, la moyenne conditionnelle du champ $A(\vec{x})$ sur les N_B segments de B est égale à

$$\langle A \mid B \rangle_i = \frac{1}{\text{card}(E_i)} \sum_{\vec{k} \in E_i} A(\vec{k}). \quad (2.6)$$

Le calcul numérique de la moyenne conditionnelle de A par B conduit à l'obtention d'une tabulation de N_B valeurs des $\langle A \mid B \rangle_i$ en fonction des centres des segments discrétisant B . Cette stratégie de calcul donne des résultats satisfaisants lorsque l'estimateur optimal est calculé avec une unique variable de conditionnement. C'est le cas lorsque l'estimateur optimal est utilisé comme outil de diagnostic aux chapitres 3 et 4, ou lors des premiers tests visant à utiliser directement l'estimateur optimal comme modèle sous-maille dans la première partie du chapitre 4.

Cependant, le choix du nombre de segments discrétisant la variable B a un impact sur la valeur finale de l'estimateur optimal. De plus, ce choix ne peut pas être universel car il dépend grandement de la distribution des valeurs du champ B . Pour montrer cette dépendance, dans le chapitre 4 (section 4.2), deux calculs d'erreur généralisée de l'estimateur optimal définie à l'équation (4.14) et pour deux variables de conditionnement différentes, sont effectués (cf. figure 4.1) pour trouver numériquement une valeur "optimale" de nombre de segments qui minimisera cette erreur généralisée. Les deux erreurs généralisées aboutissent toutes les deux à un nombre de segments assez voisin, aux alentours de ≈ 300 puisque les distributions de variable B sont similaires.

Cette dépendance de l'estimateur optimal vis-à-vis du nombre de segments discrétisant sa variable de conditionnement s'accroît avec l'augmentation du nombre de variables de conditionnement.

Moyenne conditionnelle de plusieurs variables

Il a été observé qu'en gardant un échantillonnage des variables de conditionnement constant, *i.e.* $\delta = cst$, l'erreur quadratique de l'estimateur optimal avec le champ qu'il estime était élevée. Une autre stratégie de calcul de l'estimateur optimal a été utilisée pour tenter de minimiser cette erreur. C'est une alternative dynamique de celle proposée par Antoine Moreau dans l'annexe de sa thèse [58]. Dans sa thèse, A. Moreau propose une méthode de distribution des bornes des segments de la variable B en loi de puissance du type :

$$\frac{\beta_i}{\max(B) - \min(B)} = \left(\frac{i}{N_B} \right)^p \quad \text{avec } p > 0 \quad \text{et } i \in \llbracket 1 : N_B \rrbracket, \quad (2.7)$$

où β_i est la borne supérieure du segment i . Cette méthode est statique et adaptée à des variables de conditionnement avec un unique pic de densité de probabilité. De plus il faut ajuster p en fonction de sa position dans la plage $\max(B) - \min(B)$. Dans ce travail, la méthode de discrétisation des variables de conditionnement à pas non constant est suivie tout en développant une méthode ne nécessitant ni une forme de densité de probabilité particulière ni de la connaître. Nous montrerons numériquement que cette méthode n'apporte pas d'amélioration à la méthode histogramme classique lorsqu'elle est utilisée pour une unique variable de conditionnement, donc elle sera exclusivement mise en oeuvre dans les calculs de moyennes conditionnelles de plusieurs variables.

Dans le cas des moyennes conditionnelles à n variables $\{B_1, \dots, B_j, \dots, B_n\}$, les sous-ensembles E_i (2.5) définissant les listes des points qui composent la fonction de densité de probabilité jointe des variables de conditionnement, deviennent dans le cas de longueurs de segments constantes et propres à chaque

variable :

$$E_i = \left\{ \vec{x} \mid C_{B_j}(k_{ij}) - \delta_j/2 \leq B_j(\vec{x}) < C_{B_j}(k_{ij}) + \delta_j/2, \forall j \in \llbracket 1 : n \rrbracket \right\}, \quad i \in \llbracket 1 : K \rrbracket \quad (2.8)$$

où k_{ij} est une matrice d'ordre 2 de dimensions $K \times n$ contenant les combinaisons des coordonnées des segments j locaux à chaque variable, et représentant le segment global i . Cela augmente considérablement le nombre de segments de calcul de la moyenne conditionnelle puisqu'il passe à $K = \prod_{j=1}^n N_{B_j}$ segments. Parallèlement la probabilité qu'il existe des variables de conditionnement dans un intervalle i chute aussi, ce qui augmente les chances d'avoir des segments d'échantillonnage de moyenne conditionnelle non convergés.

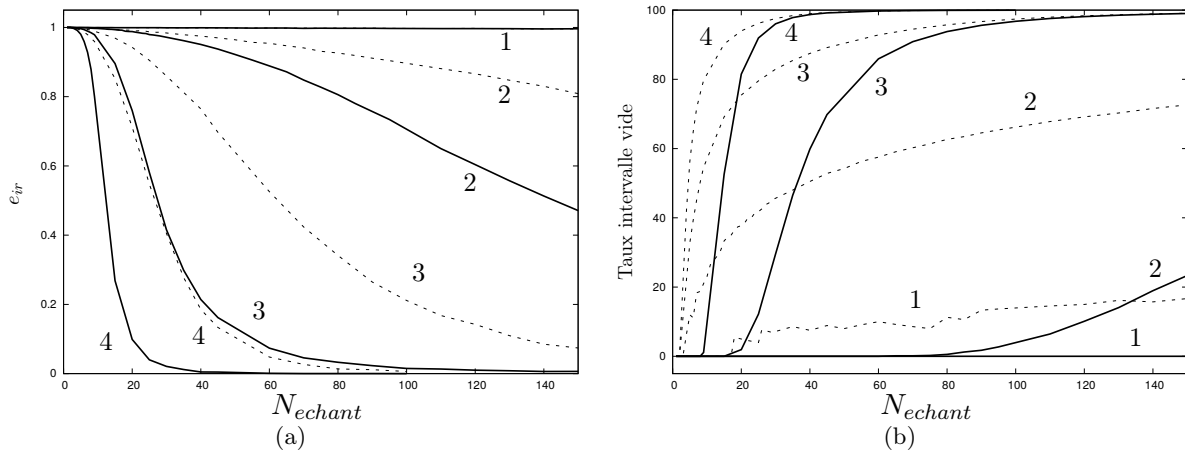


FIGURE 2.1 – (a) évolution des erreurs irréductibles et (b) évolution du nombre d'intervalles d'échantillonnage ne contenant pas de points en fonction du nombre de segments d'échantillonnages par variable de conditionnement pour les méthodes histogrammes à échantillonnage constant (- - -) et dynamique (—). Dans les deux figures, les calculs sont effectués pour des moyennes conditionnelles allant de 1 à 4 variables. Les courbes sont indicées par le nombre de variables de conditionnement.

Deux méthodes de calcul de ces moyennes conditionnelles sont possibles. Une première dite à échantillonnage constant où $\delta = cst$ à l'image de la technique à une seule variable. La seconde méthode, dite à **échantillonnage dynamique** où les longueurs des segments j de chaque variable i et notés δ_{ij} sont définies de sorte que la densité de probabilité de chacune des variables de conditionnement soit équirépartie. Ceci implique un calcul *a priori* des bornes de chacun de ces intervalles en fonction de la distribution de chaque variable de conditionnement.

Sur les figures 2.1 sont représentées les évolutions des erreurs irréductibles (cf. figure 2.1(a)) et du taux de segment d'échantillonnage vide (cf. figure 2.1(b)) en fonction du nombre de segments N_{B_j} discrétisant chaque variable B_j . Dans les cas multivariés, les nombres de segments sont les mêmes pour toutes les variables. Sur la figure 2.1, on constate que pour le calcul de l'erreur irréductible de l'estimateur optimal à une variable, la stratégie à échantillonnage dynamique n'a aucun segment d'échantillonnage vide alors que pour la stratégie à échantillonnage constant, dès que la discrétisation dépasse 20 segments, des segments vides apparaissent. Par contre la stratégie d'échantillonnage a peu d'influence sur l'erreur irréductible. Elles sont toutes les deux superposées et très élevées.

Des différences d'erreur irréductible entre les deux stratégies apparaissent dès que le nombre de variables de conditionnement est supérieur à 1. Dans ces cas, l'erreur irréductible calculée avec l'échantillonnage dynamique est toujours inférieure à celle calculée avec l'échantillonnage constant pour le même nombre de segments par variable de conditionnement.

La stratégie de moyenne conditionnelle par méthode histogramme dynamique permet de sensiblement améliorer la convergence. Ainsi elle sera utilisée pour les diagnostics de variables de modèle sous-maille de plus d'une variable dans tous les chapitres de résultat de ce mémoire. Cependant, cette stratégie

ne sera pas utilisée lorsqu'il s'agira d'appliquer directement l'estimateur optimal comme modèle sous-maille. En effet, la tabulation des modèles sous-maille multivariables serait trop biaisée et il faudrait faire intervenir des polynômes d'interpolation afin de lisser le modèle qui en serait issu. Dans ces cas bien précis, nous nous tournerons directement vers la construction de modèles de substitution de type réseaux de neurones qui sont également connus pour leurs aptitudes à être des estimateurs optimaux [59].

Les réseaux de neurones sont des fonctions non-linéaires et paramétrables qui sont capables d'approximer n'importe quel nuage de points de valeurs discrètes, tant que le nombre de degrés de liberté du réseau de neurones est assez grand. Cette technique sera utilisée dans le chapitre 4 où une présentation rapide sera donnée dans la section 4.4.

2.3 Tests *a priori* et *a posteriori* d'un modèle sous-maille

L'utilisation des concepts qui viennent d'être présentés nécessite une connaissance de quantités exactes. Ces quantités exactes sont nécessaires pour évaluer les performances fonctionnelles en comparant les dissipations sous-maille exactes à celles générées par les modèles. Soit la comparaison des termes :

$$\langle \tau_{ij} \bar{S}_{ij} \rangle^{exact} \quad \text{et} \quad \langle \tau_{ij} \bar{S}_{ij} \rangle^{modele}, \quad (2.9)$$

pour la vitesse et

$$\left\langle \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i} \tau_i \right\rangle^{exact} \quad \text{et} \quad \left\langle \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i} \tau_i \right\rangle^{modele}, \quad (2.10)$$

pour le scalaire. Pour l'évaluation des performances structurelles, le calcul de l'erreur quadratique, Eq. (2.1), et la décomposition de cette erreur pour faire intervenir l'erreur irréductible, Eq. (2.2), nécessitent une connaissance des termes que l'on cherche à modéliser. Ainsi, ces évaluations ne sont possibles qu'*a priori*. Dans ce mémoire ces tests *a priori* sont menés via l'analyse d'une base de données de SND. Les champs SND sont filtrés afin de calculer les différentes quantités SGE. Le terme exact et son modèle sont ainsi connus en tous points, permettant une comparaison locale, et l'évaluation des différents critères de performances. La phase de tests *a priori* constitue ainsi la première étape d'analyse des modèles.

Techniquement, tous les tests *a priori* seront réalisés avec le filtre de coupure spectral. Ce filtre reproduit le filtre implicite lors de SGE réalisées avec des méthodes numériques spectrales qui sont les méthodes utilisées dans le code de calcul. Les critères d'évaluation des performances seront tous en fonction du rapport entre la longueur de coupure du filtre et de la taille de la cellule de la grille SND, de rapport noté Δ/Δ .

La seconde étape s'appuiera sur des tests *a posteriori*. Il s'agira ainsi de réaliser des SGE utilisant les modèles sous-maille testés. Le comportement chaotique de la turbulence et du mélange associé ne permet pas d'envisager une comparaison locale des grandeurs instantanées de la SGE avec celles d'une SND de référence, lors de cette étape. Les erreurs quadratiques et irréductibles ne peuvent donc plus être pertinemment confrontées. Il s'agira alors de comparer les quantités statistiques globales telles que la moyenne et la fluctuation dans les directions homogènes de la configuration, puis les spectres et les fonctions de densité de probabilité.

2.4 Outils numériques : base de données SND

Comme cela vient d'être évoqué, les tests *a priori* menés reposent sur une base de données permettant d'évaluer les termes que l'on cherche à modéliser. Les bases de données sont donc calculées par SND avec un code pseudo-spectral [11] développé au sein de l'équipe de recherche MoST (Modélisation et Simulation de la Turbulence) du LEGI (Laboratoire des Écoulements Géophysiques et Industriels). Ce code résout les équations du système de Navier-Stokes dans un domaine cubique et 2π périodique. L'avancement temporel des équations est effectué par un schéma de type Runge-Kutta d'ordre 2 et la règle de "dealiasing" classique est appliquée aux champs 3D.

Grâce aux méthodes spectrales, les calculs *a priori* de performance structurelle sont exempts d'erreurs numériques et ils ne prennent donc en compte que les erreurs de modélisation du terme sous-maille étudié. De plus, les méthodes numériques spectrales induisent un filtrage implicite qui est reproduit par le filtre de type coupure spectrale. Concrètement, les performances calculées *a priori* sur une base de données de SND filtrée seront identiques aux performances calculées *a posteriori* depuis la même base de données filtrées. Ce cas de figure se rencontre lorsque qu'une SGE est initialisée avec une base de donnée filtrée qui est issue de celle utilisée pour les tests *a priori* du même modèle.

Deux bases de données pour la vitesse sont utilisées dans ce mémoire. Elles sont statistiquement convergées vers un état stationnaire de THI. Ces champs de vitesse sont obtenus par l'emploi d'un forçage de type de Alvelius [1] avec $k_{max} l_\eta = 1.5$. Cela permet de résoudre jusqu'à l'échelle de Kolmogorov afin de s'assurer de la dissipation totale de l'énergie injectée aux grandes échelles [72]. Les forçages permettent d'atteindre des nombres de Reynolds basés sur l'échelle de Taylor de $Re_\lambda = 90$ et $Re_\lambda = 160$. Ces niveaux de turbulence nécessitent des grilles de résolutions de 256^3 et 512^3 points, respectivement.

Les bases de données de scalaire passif utilisées sont de nombres de Schmidt moléculaire $Sc = 0.7$ et $Sc = 16$. Les bases de données de scalaire à $Sc = 0.7$ sont résolues sur des grilles de 256^3 et 512^3 points de grille pour les champs de vitesses de $Re_\lambda = 90$ et 160 , respectivement. Pour le cas à $Re_\lambda = 90$ et $Sc = 0.7$, le scalaire est maintenu par un forçage aléatoire des premiers nombres d'onde dans l'espace spectral de façon similaire à la méthode d'Alvelius pour la vitesse. Le cas $Re_\lambda = 160$ et $Sc = 0.7$ correspond à la décroissance libre d'un scalaire initialisé par la méthode d'Eswaran & Pope [28]. Le champ de scalaire est extrait au moment où toutes les valeurs de scalaire sont présentes de façon équiprobable dans le domaine de calcul.

Le champ de scalaire de nombre de Schmidt moléculaire $Sc = 16$ est transporté avec le champ de vitesse de nombre de Reynolds $Re_\lambda = 90$. Le calcul de ce champ de scalaire utilise le couplage de méthodes de résolution spectrale et particulière. L'association de ces méthodes numériques permet de résoudre le scalaire à un nombre de Schmidt $Sc > 1$ avec une erreur numérique minimale sur le terme de convection du scalaire tout en minimisant les temps de calcul pour atteindre un état de mélange donné [44]. Afin de respecter la résolution complète de ce champ jusqu'à l'échelle de Batchelor, il est calculé sur une grille de 1024^3 points et son état de convergence est obtenu via le forçage aléatoire des premiers nombres d'onde dans l'espace spectral.

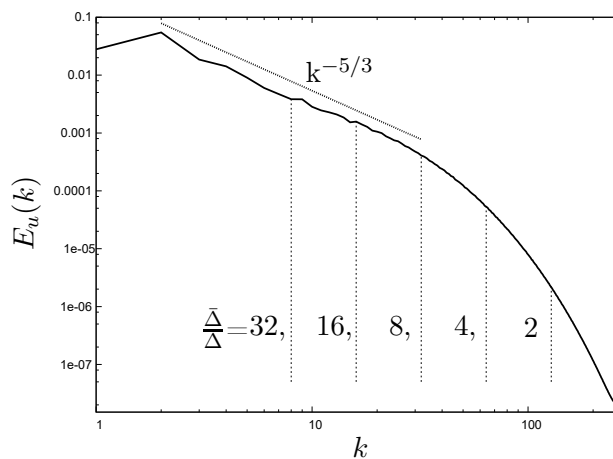


FIGURE 2.2 – Spectre de l'énergie cinétique du champ de vitesse de THI résolu sur 512^3 points de grille à $Re_\lambda = 160$.

Ces bases de données montrent les statistiques classiques observables sur ce type de champ : des zones inertielles avec des pentes en $k^{-5/3}$ et des zones de dissipation sur les spectres de l'énergie cinétique (cf. figure 2.2), les spectres de variance des scalaires de nombre de Schmidt moléculaire $Sc = 0.7$ montrent des comportements similaires et en accord avec la théorie (cf. figure 2.3(a)) avec une superposition des échelles de Batchelor et de Kolmogorov, une pente en $k^{-5/3}$ dans la zone convective-inertielle et une

penne en k^{-1} dans la zone visqueuse-convective sur le spectre de la variance du scalaire de nombre de Schmidt moléculaire $Sc = 16$ (cf. figure 2.3(b)).

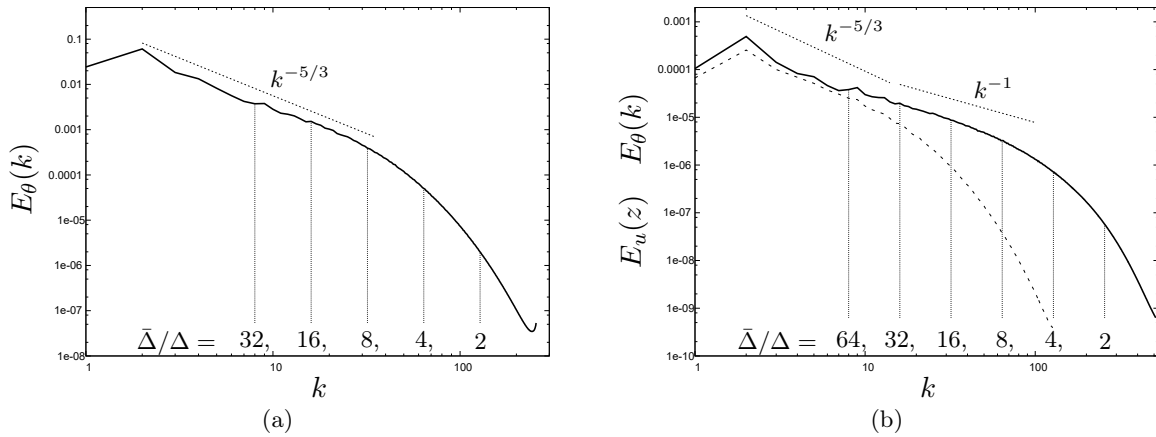


FIGURE 2.3 – Spectres de la variance du scalaire (—) des bases de données $Re_\lambda = 160$, $Sc = 0.7$ (a) et $Re_\lambda = 90$, $Sc = 16$ (b) utilisées pour les tests *a priori*. Le spectre d'énergie cinétique (- - -) est également représenté pour la seconde base de données afin d'illustrer la séparation d'échelles. La position des différentes tailles de filtre est également illustrée.

Dans la suite du mémoire, ces bases de données seront exploitées, en lien avec le concept d'estimateur optimal, pour mener des tests *a priori* afin de poser des diagnostics sur les modèles sous-maille existants mais aussi sur des modèles élaborés dans ce mémoire. Ces bases de données vont également servir de base d'entraînement pour les modèles basés sur des techniques d'apprentissage de type réseaux de neurones (chapitres 4 et 5).

2.5 Méthodologies suivies

Les concepts qui viennent d'être définis vont être utilisés dans les trois prochains chapitres avec différentes stratégies visant chacune à proposer de nouvelles approches de modélisation. Ainsi dans le prochain chapitre (chapitre 3), la stratégie est d'améliorer la performance fonctionnelle et structurelle du modèle du gradient, Eqs. (1.55) et (1.56), qui est un modèle basé sur une stratégie de modélisation structurelle. Une régularisation algébrique de ce modèle est proposée et des tests *a priori* sont d'abord menés pour mesurer l'amélioration obtenue. Le concept d'estimateur optimal permet de mesurer objectivement la performance de la nouvelle formulation proposée. Des tests *a posteriori* sont finalement réalisés pour confirmer les performances des nouveaux modèles algébriques proposés. Ce premier chapitre illustre donc l'intérêt de la notion d'estimateur optimal comme outil de diagnostic d'un modèle sous-maille.

Dans le chapitre 4, nous proposerons une nouvelle approche de modélisation puisque nous chercherons à appliquer l'estimateur optimal directement comme modèle sous-maille. A cette fin, une première approche de modèle sous-maille s'appuyant sur un calcul d'estimateur optimal par tabulation est effectuée. Ensuite une nouvelle approche de calcul d'estimateur optimal se basant sur un modèle substitut de type réseaux de neurones est développée. Des tests *a priori* de ces modèles confirment les bonnes performances fonctionnelle et structurelle. Cependant, les tests *a posteriori* menés montrent que ces modèles sont trop spécialisés et ne permettent pas de simuler des configurations d'écoulements s'écartant des bases de données utilisées pour les générer.

Finalement, une approche hybride est proposée dans le chapitre 5. Cette approche, vise à étendre l'universalité des modèles sous-maille construits avec les modèles substitués de type réseaux de neurones. Le point de départ des modèles proposés sera les décompositions vectorielles et tensorielles des

termes sous-maille faisant apparaître des coefficients à fixer. Ces coefficients seront calculés dynamiquement par des réseaux de neurones. Dans le développement de ces modèles, les tests *a priori* auront pour particularité de participer directement au développement de la procédure dynamique de calcul des coefficients puisque les procédures dynamiques seront mises au point en optimisant les performances structurelles et fonctionnelles des modèles sous-maille calculés *a priori* sur les bases de données. Des tests *a posteriori* seront ensuite menés afin d'évaluer l'universalité de cette stratégie par rapport à celle du modèle sous-maille développé dans le chapitre 4.

Chapitre 3

Estimateur optimal : outil de diagnostic

Sommaire

3.1	Régularisation du modèle du gradient pour le scalaire	30
3.1.1	Décomposition et interprétation physique	30
3.1.2	Régularisation du <i>GM</i> avec le concept d'estimateur optimal	32
3.1.3	Choix d'un coefficient dynamique	35
3.1.4	Examen <i>a priori</i> du modèle proposé	36
3.1.5	Tests <i>a posteriori</i>	37
	Décroissance scalaire	38
	Jet turbulent	40
3.2	Régularisation du modèle du gradient pour la vitesse	42
3.2.1	Régularisation fonctionnelle	43
3.2.2	Régularisation structurelle	45
3.2.3	Procédures de calcul de coefficient dynamique	47
	Procédure dynamique à coefficient unique	47
	Procédure dynamique à 2 coefficients	47
3.2.4	Tests <i>a priori</i> des modèles régularisés	48
3.2.5	Tests <i>a posteriori</i> du modèle régularisé pour la vitesse	50
	Turbulence homogène isotrope en décroissance	51
	Turbulence homogène isotrope forcée	53
	Canal plan	54
3.3	Couplage des modèles sous-maille pour la vitesse et le scalaire	56
3.3.1	Décroissance en turbulence homogène isotrope forcée	57
3.3.2	Canal plan	59
3.4	Conclusion	61

Comme cela a été évoqué en introduction, Sagaut [80] propose de classer les modèles sous-maille en deux familles, chacune correspondant à des stratégies de modélisation différentes : *i*) l'approche fonctionnelle s'appuie sur des considérations de transferts énergétiques, *ii*) l'approche structurelle, par opposition, ne tient pas compte de ces transferts et a pour unique but de reproduire le terme sous-maille exact. Ainsi, les performances d'un modèle peuvent être caractérisées en termes de performances structurelles et fonctionnelles.

Les modèles dits mixtes, tels que le modèle de Clark dynamique *et al.* [13], ou le modèle mixte formulé par Zang *et al.* [101], incluant le modèle de Bardina *et al.* [6], sont des modèles qui cherchent à assurer de bonnes performances structurelles et fonctionnelles, en combinant un modèle basé sur une approche structurelle et un modèle basé sur une approche fonctionnelle. Toutefois cette combinaison est effectuée par l'ajustement de deux coefficients ce qui rend assez artificielle la double performance attendue de ces modèles.

L'objet de ce chapitre est de proposer des modèles nativement "structuro-fonctionnel" respectivement pour le vecteur sous-maille du scalaire passif et pour le tenseur sous-maille de la vitesse. Leurs propriétés structurelles s'expliquent par le point de départ de leurs formulations qui s'appuient sur le modèle du gradient de leurs termes sous-maille respectifs. Les propriétés fonctionnelles découlent de la méthode de régularisation qui consiste à sélectionner des termes en tenant compte des transferts énergétiques.

La régularisation du modèle du gradient pour le scalaire passif est traitée en premier. A partir d'une interprétation du rôle joué par les gradients de vitesse résolus dans la dissipation sous-maille de variance du scalaire résolue, des régularisations du modèle du gradient pour le scalaire passif sont proposées. Dans le cadre de ces régularisations, le concept d'estimateur optimal est ainsi utilisé *a priori* pour mesurer les performances structurelles des nouveaux modèles proposés. Des tests *a posteriori* sont également menés pour comparer les nouveaux modèles proposés aux modèles les plus classiquement utilisés. L'application d'une démarche similaire est ensuite proposée pour permettre la régularisation du modèle du gradient pour la vitesse.

La régularisation des modèles du gradient pour la vitesse et le scalaire vont conduire à une nouvelle famille de modèle dite "régularisée" au même titre que les modèles de Smagorinsky pour le scalaire et la vitesse constituent une famille de modèle. La dernière partie sera consacrée au couplage de SGE scalaire/vitesse pour comparer les prédictions d'évolution de statistique de scalaire passif résolu pour les deux familles de modèle.

3.1 Régularisation du modèle du gradient pour le scalaire

Le point de départ est de considérer le modèle du gradient (*GM*) pour le flux de scalaire sous-maille introduit dans le chapitre 1 à la section 1.2.2,

$$\tau_i^{GM} = \frac{\bar{\Delta}^2}{12} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_j}, \quad (3.1)$$

avec $\bar{\Delta}$ la longueur de coupure du filtre. Comme ce modèle est issu du développement de Taylor de l'opération de filtrage [9], il fait partie des modèles structuraux. Ce modèle a donc de bonnes performances structurelles, mais il conduit à des simulations instables en raison de mauvaises performances fonctionnelles [31].

L'objectif de cette étude est d'interpréter les échanges de variance du scalaire sous-maille opérés par ce modèle, afin d'en proposer une régularisation. Il est à noter qu'un modèle structurel a été choisi comme point de départ car il semble difficile de pouvoir justifier un modèle de type diffusivité sous-maille comme la plupart des modèles fonctionnels, du point de vue de la modélisation structurelle, puisque le vecteur de flux scalaire sous-maille et le vecteur des gradients du scalaire résolu ne sont pas alignés d'une façon générale [36]. L'idée est donc de montrer qu'une approche de modélisation de type gradient, grâce à la procédure de régularisation, peut se justifier également du point de vue d'une approche de modélisation fonctionnelle.

3.1.1 Décomposition et interprétation physique

Les gradients de vitesse $\partial \bar{u}_i / \partial x_j$ qui apparaissent dans le modèle (3.1) peuvent être décomposés en leurs parties symétriques et antisymétriques respectivement $\bar{S}_{ij} = 1/2 (\partial \bar{u}_i / \partial x_j + \partial \bar{u}_j / \partial x_i)$ le tenseur des taux de déformation et $\bar{\Omega}_{ij} = 1/2 (\partial \bar{u}_i / \partial x_j - \partial \bar{u}_j / \partial x_i)$ le tenseur des taux de rotation. Par conséquent le modèle (3.1) se réécrit :

$$\tau_i^{GM} = \frac{\bar{\Delta}^2}{12} (\bar{S}_{ij} + \bar{\Omega}_{ij}) \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_j}. \quad (3.2)$$

Cette réécriture permet d'interpréter le modèle du gradient comme la composition des effets de déformation et de rotation du champ de vitesse résolu sur les gradients du scalaire résolu. Puisque le tenseur filtré du taux de déformation est représenté par une matrice symétrique réelle, d'après le théorème spectral, il est diagonalisable, ses valeurs propres sont réelles et il peut être décomposé comme,

$$\bar{S}_{ij} = \sum_{k=1}^3 \lambda^{(k)} e_i^{(k)} e_j^{(k)}, \quad (3.3)$$

avec $\lambda^{(k)}$ les valeurs propres et $e_i^{(k)}$ les composantes de norme unitaire du vecteur propre associé à $\lambda^{(k)}$. Le modèle du gradient devient

$$\tau_i^{GM} = \frac{\bar{\Delta}^2}{12} (\bar{S}_{ij}^{\oplus} + \bar{S}_{ij}^{\ominus} + \bar{\Omega}_{ij}) \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_j}, \quad (3.4)$$

avec

$$\bar{S}_{ij}^{\oplus} = \sum_{k=1}^3 \max(\lambda^{(k)}, 0) e_i^{(k)} e_j^{(k)}, \quad (3.5)$$

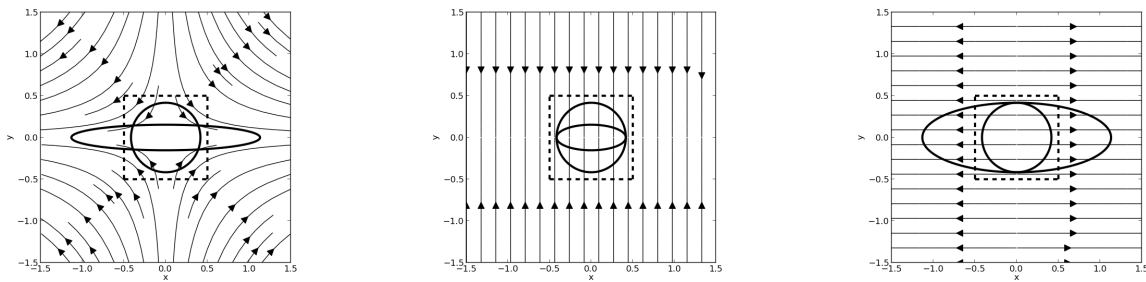
et

$$\bar{S}_{ij}^{\ominus} = \sum_{k=1}^3 \min(\lambda^{(k)}, 0) e_i^{(k)} e_j^{(k)}. \quad (3.6)$$

Une méthode analytique de calcul des termes \bar{S}_{ij}^{\oplus} et \bar{S}_{ij}^{\ominus} est présentée dans l'annexe C. Afin d'interpréter le rôle fonctionnel du modèle du gradient, donc les transferts entre les échelles résolues et sous-maille qu'il prédit, la dissipation sous-maille (voir section 1.2.2 du chapitre 1) de ce modèle peut être réécrite avec la décomposition (3.2) :

$$\begin{aligned} \tau_i^{GM} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i} &= \frac{\bar{\Delta}^2}{12} (\bar{S}_{ij} + \bar{\Omega}_{ij}) \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_j} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i} \\ &= \frac{\bar{\Delta}^2}{12} \sum_{k=1}^3 \lambda^{(k)} e_i^{(k)} e_j^{(k)} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_j} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i} \\ &= \frac{\bar{\Delta}^2}{12} \sum_{k=1}^3 \lambda^{(k)} \left(e_i^{(k)} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i} \right)^2, \end{aligned} \quad (3.7)$$

puisque $\bar{\Omega}_{ij} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_j} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i} = 0$. Le signe de la dissipation sous-maille est donc donné par le signe des valeurs propres de \bar{S} .



(a) étirement et compression

(b) compression pure

(c) étirement pur

FIGURE 3.1 – Illustration du développement du mélange dans une configuration bi-dimensionnelle. Le contour $\theta(x, y, t) = \frac{1}{2}\theta(0, 0, 0)$ est montré pour $t = 0$ (cercle) et pour $t = \alpha^{-1}$ pour le cas associant l'étirement et la compression (a), pour le cas de compression pure (b) et pour le cas d'étirement pur (c). Le carré représenté en ligne discontinue représente la maille dans laquelle la variance du scalaire sous maille, $\bar{\theta}^2 - \bar{\theta}^2$, est calculée dans la figure 3.2.

Puisque les valeurs propres négatives et positives de $\bar{\mathbf{S}}$ correspondent respectivement aux effets de compression et d'étirement par le champ de vitesse résolue [68], une interprétation physique du modèle du gradient peut être proposée en termes d'effets de compression, d'étirement et de rotation du champ de vitesse résolue sur le mélange. Les effets de rotation n'auront pas de conséquences sur la dissipation sous-maille. Les transferts énergétiques de variance sous-maille semblent seulement causés par les effets de déformation. La compression de l'écoulement conduira à une création de petites échelles du mélange avec un transfert direct de la variance des grandes vers les petites échelles. Inversement, les effets d'étirement mènent à un transfert inverse de variance du scalaire des petites vers les grandes échelles.

Cette analyse conduit à une interprétation fonctionnelle du modèle du gradient. L'interprétation du rôle joué par les effets de compression et d'étirement sur le mélange s'appuie sur ce modèle. Une illustration a pu être réalisée sur un cas d'écoulement modèle par J. Le Sommer (LGGE, Grenoble) qui a collaboré à cette étude [3]. Ce cas modèle considère un scalaire passif initialisé avec une loi gaussienne, centrée en $(x, y) = (0, 0)$, dans un écoulement caractérisé par une compression pure dans la direction y et un étirement pur dans la direction x . Le champ de vitesse a ainsi la forme $(u, v) = (\alpha x, -\alpha y)$ avec $\alpha > 0$. De cette configuration, l'évolution temporelle de la distribution de scalaire peut être calculée analytiquement. La figure 3.1(a) montre que le scalaire a été étiré dans la direction x et comprimé dans la direction y . Les effets d'étirement de l'écoulement subis par le scalaire dans la direction x (figure 3.1(c)) correspondent bien à une création d'échelles du mélange supérieures à l'échelle initiale. Inversement, les effets de compression de l'écoulement imposés au scalaire dans la direction y correspondent bien à une création d'échelles du mélange inférieures à l'échelle initiale, figure 3.1(b). C'est cette génération d'échelles qui contrôlera l'évolution de la variance du scalaire sous-maille, $\bar{\theta}^2 - \bar{\theta}^2$.

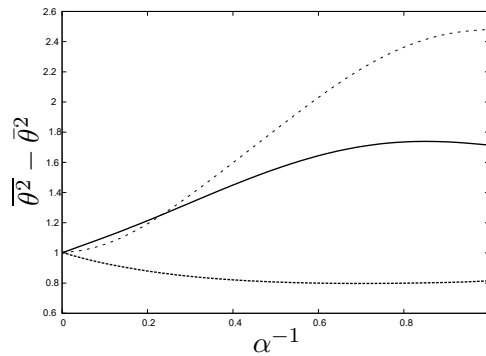


FIGURE 3.2 – Evolution de la variance sous-maille pour les cas de champ de vitesse $(u, v) = (\alpha x, -\alpha y)$ (—), $(u, v) = (0, -\alpha y)$ (- - -) et $(u, v) = (\alpha x, 0)$ (- · - ·) en fonction de l'évolution temporelle en α^{-1} .

Les trois cas d'évolution de variance du scalaire sous-maille dans une "maille" représentée par le carré en ligne discontinue dans la figure 3.1 sont illustrés sur la figure 3.2. Comme attendu, le cas associant les effets d'étirement et de compression de l'écoulement conduit à une croissance de la variance du scalaire sous-maille, donc principalement à un transfert des échelles résolues vers les échelles sous-maille. Si seuls les effets de compression sont retenus, le transfert est observé dans la même direction, avec une croissance de la variance sous-maille. C'est seulement dans le cas où les seuls effets d'étirement sont retenus qu'un transfert inverse, des échelles sous-maille vers les échelles résolues, est observé, conduisant à la décroissance de la variance du scalaire sous-maille initiale. L'analyse permise par cette configuration d'écoulement modèle montre que l'évolution de la variance scalaire sous-maille est en accord avec l'interprétation déduite du modèle du gradient.

3.1.2 Choix de la régularisation du modèle du gradient basé sur le concept d'estimateur optimal

Notre objectif est de construire un modèle permettant de conserver les bonnes performances structurelles du modèle du gradient tout en ne conservant que la prédiction de transfert direct de la variance

du scalaire. D'après les tests analytiques menés dans le paragraphe précédent, il semble que les phénomènes d'étirement soient responsables du backscatter. En supprimant ces effets du champ de vitesse résolu du calcul du modèle sous-maille, des simulations stables peuvent être espérées. Cette idée revient à améliorer les performances fonctionnelles du modèle *GM*. Dans ce but, à partir de la décomposition du modèle du gradient de la relation (3.4), deux modèles sont possibles. Le premier noté *RGM1* (pour Regularized Gradient Model 1) s'écrit :

$$\tau_i^{RGM1} = \frac{\bar{\Delta}^2}{12} \bar{S}_{ij}^\ominus \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_j}, \quad (3.8)$$

Il n'intègre que le terme de compression du champ de vitesse résolu tandis que le second, noté *RGM2*, est la combinaison des effets de compression et de rotation du champ de vitesse résolu

$$\tau_i^{RGM2} = \frac{\bar{\Delta}^2}{12} (\bar{S}_{ij}^\ominus + \bar{\Omega}_{ij}) \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_j}. \quad (3.9)$$

Ces deux modèles prédisent la même dissipation sous-maille de variance du scalaire résolu et ils ont donc les mêmes performances fonctionnelles. Ces modèles à diffusivité sous-maille tensorielle peuvent être rapprochés du modèle bidimensionnel proposé par Le Sommer *et al.* [48] pour les mouvements océaniques. Enfin, cette approche de régularisation s'apparente à celle utilisée par Cottet & Wray [15] pour développer un tenseur sous-maille anisotrope.

Pour finaliser le développement du nouveau modèle, des tests *a priori* sont menés sur la base des modèles *RGM1* (3.8) et *RGM2* (3.9). Ils ont pour objectif de mesurer les performances structurelles et fonctionnelles et de les comparer à celles des modèles classiques du gradient (noté *GM* et présenté par l'équation (1.55) dans le chapitre 1) et de Smagorinsky (noté *DSM* et présenté par l'équation (1.56) dans le chapitre 1).

Deux bases de données SND sont utilisées pour ces évaluations de performances. Toutes les deux sont des THIF avec un forçage de type Alveluis [1] sur le champ de vitesse.

La première THIF est résolue sur 512^3 points de grille et conduit à un nombre de Reynolds basé sur la micro-échelle de Taylor de $Re_\lambda = 160$. Le scalaire a un nombre de Schmidt moléculaire unitaire et il est en décroissance libre. L'instant de mélange retenu pour effectuer les tests *a priori* est celui ayant une équiprobabilité d'existence des valeurs de scalaire tel que présenté dans la section 2.4 du chapitre 2. Un spectre de la variance de ce champ est présenté sur la figure 2.3(a) du chapitre 2.

Pour la seconde THIF, le champ de vitesse est résolu sur 256^3 points de grille avec un niveau de turbulence basé sur la micro-échelle de Taylor de $Re_\lambda = 90$. Le champ de scalaire est forcé et a un nombre de Schmidt moléculaire de 16 afin de tester l'influence du nombre de Schmidt moléculaire sur les performances des modèles. Compte-tenu des propriétés physiques, le champ de scalaire est discrétisé sur un maillage de 1024 points dans chaque direction afin de résoudre directement toutes les échelles du mélange. Les champs de vitesse et de scalaire sont à un régime statistiquement stationnaire par le biais de leurs forçages respectifs et ils sont représentés par les spectres de la figure 2.3(b) du chapitre 2.

Un filtre spectral est utilisé pour émuler les quantités SGE afin de tester *a priori* les performances des modèles. Sur les spectres 2.3 figurent également les différentes longueurs de coupure utilisées pour le filtrage.

La divergence du flux scalaire sous-maille est la quantité que nous cherchons à modéliser. La meilleure formulation est recherchée parmi celles proposées dans les deux équations (3.8) et (3.9). L'erreur irréductible de chacun de ces jeux de variables est calculée afin de retenir la formulation menant à la meilleure performance structurelle potentielle. Cette démarche nous conduit à utiliser l'estimateur optimal à la manière d'un évaluateur de performances structurelles, tel que Moreau *et al.* [59] l'ont utilisé initialement dans le contexte de la SGE. Comme expliqué dans le chapitre 2 à la section 2.2, le calcul de l'erreur irréductible consiste à calculer l'erreur quadratique entre la quantité exacte et l'estimateur

optimal du modèle à considérer. Les estimateurs optimaux sont fonctions des jeux de variables issus des modèles à tester. Dans notre cas, ce sont des jeux à une variable dont les expressions sont :

— pour le *DSM*

$$\phi^{DSM} = \bar{\Delta}^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(|\bar{S}| \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i} \right), \quad (3.10)$$

— pour le *GM*

$$\phi^{GM} = \bar{\Delta}^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_k} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_k} \right), \quad (3.11)$$

— et pour les *RGM*

$$\phi^{RGM1} = \bar{\Delta}^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{S}_{ik}^{\ominus} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_k} \right), \quad (3.12)$$

$$\phi^{RGM2} = \bar{\Delta}^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \left((\bar{S}_{ik}^{\ominus} + \bar{\Omega}_{ik}) \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_k} \right). \quad (3.13)$$

Pour les modèles *RGM*, il est également possible de déterminer un jeu de deux variables défini comme

$$\{\phi\}^{RGM3} = \left\{ \bar{\Delta}^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{S}_{ik}^{\ominus} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_k} \right), \bar{\Delta}^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\Omega}_{ik} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_k} \right) \right\}. \quad (3.14)$$

Comme les jeux de variables ϕ^{RGM1} et ϕ^{RGM2} peuvent être déduits du jeu de variables $\{\phi\}^{RGM3}$, d'après la définition de l'estimateur optimal, l'erreur irréductible calculée avec $\{\phi\}^{RGM3}$ sera inférieure aux erreurs calculées avec les jeux de variables ϕ^{RGM1} et ϕ^{RGM2} . Dans le cas où les jeux de variables ϕ^{RGM1} et ϕ^{RGM2} n'aboutiraient pas à des résultats satisfaisants, il serait possible d'envisager la construction d'un modèle sous-maille basé sur le jeu de variables $\{\phi\}^{RGM3}$. Le découplage des termes devrait alors être effectué par le calcul de deux coefficients distincts. Les erreurs irréductibles calculées pour les différents jeux de variables en fonction de la longueur de coupure du filtre sont représentées sur les figures 3.3.

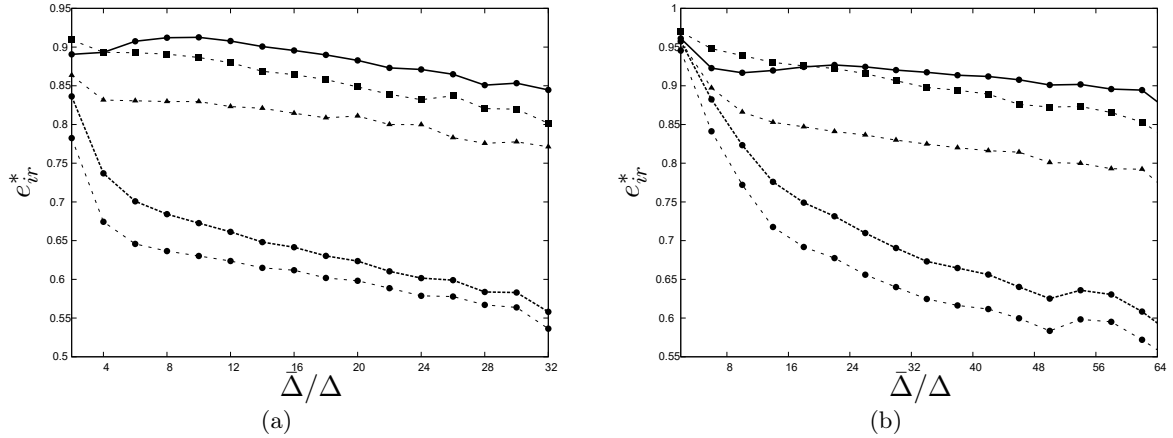


FIGURE 3.3 – Evolution des erreurs irréductibles des jeux de variables ϕ^{GM} (-▲-), ϕ^{DSM} (-■-), ϕ^{RGM1} (-●-), ϕ^{RGM2} (-●-) et $\{\phi\}^{RGM3}$ (-●-) sur les bases de données $Re_\lambda = 160$, $Sc = 0.7$ (a) et $Re_\lambda = 90$, $Sc = 16$ (b)

Pour la première base de données utilisée pour les tests de la figure 3.3(a), le nombre de Schmidt unitaire conduit à des échelles de dissipation d'énergie cinétique et de variance du scalaire similaires, alors que dans la seconde base de données utilisée pour les tests de la figure 3.3(b), il existe une séparation entre ces échelles due au nombre de Schmidt moléculaire plus élevé. Cette séparation entre les échelles dissipatives du champ de vitesse et de scalaire introduit une zone inertielle-convective en k^{-1} dans le spectre de la variance du scalaire (figure 2.3(b)).

Malgré les différentes physiques de mélange, les conclusions sur la performance structurelle potentielle

des modèles sont communes aux deux bases de données. Comme attendu, le jeu de variables ϕ^{GM} a une erreur irréductible inférieure au jeu de variables ϕ^{DSM} ce qui montre la meilleure corrélation du jeu de variables GM avec le terme exact. Ce résultat confirme la moins bonne corrélation des modèles à diffusivité sous-maille de type fonctionnel par rapport aux modèles structurels (comme déjà évoqué à la section 1.2.3 du chapitre 2).

Parmi les variables issues des formulations régularisées proposées, le jeu de variables ϕ^{RGM1} conduit à une nette diminution de l'erreur irréductible en comparaison à celle calculée avec le jeu de variables ϕ^{GM} . Cela suggère qu'une régularisation du GM peut être proposée avec le jeu de variables ϕ^{RGM1} et qu'une meilleure performance structurelle que le modèle d'origine peut être obtenue. En revanche, le jeu de variables ϕ^{RGM2} conduit à une erreur irréductible nettement supérieure à celle calculée avec le jeu de variables ϕ^{GM} , voire supérieure à celle induite par le jeu de variables ϕ^{DSM} pour les tailles de filtres se trouvant dans la zone inertielle du spectre d'énergie cinétique. Par conséquent, le jeu de variables ϕ^{RGM2} n'est pas pertinent du point de vue des performances structurelles puisqu'il ne sera pas possible de proposer un modèle algébrique s'appuyant sur ce jeu de variables avec une meilleure performance structurelle que DSM . Enfin, le calcul de l'erreur irréductible du jeu de variables $\{\phi\}^{RGM3}$ montre qu'il y a effectivement une meilleure performance structurelle potentielle à attendre d'un modèle à deux coefficients distincts. Mais le gain n'est pas suffisant (au mieux 10% de l'erreur irréductible calculée avec ϕ^{RGM1}) au point de justifier le développement d'un modèle plus complexe. Cette piste ne sera donc pas explorée ici et cette perspective d'amélioration reste ouverte pour des travaux ultérieurs.

Il ressort de cette analyse que la variable ϕ^{RGM1} apparaît comme un bon compromis pour développer un modèle performant sans ajouter une trop grande complexité de développement. En associant un coefficient dynamique, la formulation du modèle algébrique noté $DRGM$ pour Dynamic Regularized Gradient Model devient :

$$\tau_i^{DRGM} = C \bar{\Delta}^2 \bar{S}_{ik}^\ominus \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_k}. \quad (3.15)$$

La suite du développement du modèle est consacrée à la mise en place d'une procédure de calcul pour le coefficient dynamique C de la relation (3.15).

3.1.3 Choix d'un coefficient dynamique

La procédure de calcul de coefficient dynamique permet au modèle de s'ajuster à l'écoulement, notamment pour le niveau de transfert d'énergie global. Cette procédure est inspirée de celle proposée par Fabre & Balarac [29] dont le but est de construire une procédure dynamique consistante avec les décompositions de Taylor à l'origine des modèles de type gradient. Le développement mathématique consiste donc à appliquer le développement de Taylor proposé par Bedford & Yeo [9] à un filtre test, noté $\hat{\cdot}$, de longueur de coupure $\hat{\Delta} = 2\bar{\Delta}$. Pour f et g des quantités de l'écoulement, ce développement de Taylor conduit à :

$$\widehat{fg} = \hat{f}\hat{g} + \frac{\hat{\Delta}^2}{12} \frac{\partial \hat{f}}{\partial x_k} \frac{\partial \hat{g}}{\partial x_k} + O(\hat{\Delta}^4). \quad (3.16)$$

En posant $f = \bar{u}_i$ et $g = \bar{\theta}$, on peut écrire :

$$\widehat{\bar{u}_i \bar{\theta}} = \hat{u}_i \hat{\theta} + \frac{\hat{\Delta}^2}{12} \frac{\partial \hat{u}_i}{\partial x_k} \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial x_k} + O(\hat{\Delta}^4). \quad (3.17)$$

En négligeant les termes d'ordre supérieur à 2 et en effectuant la même régularisation conduisant à l'expression (3.15), on obtient :

$$\widehat{\bar{u}_i \bar{\theta}} = \hat{u}_i \hat{\theta} + C \hat{\Delta}^2 \hat{S}_{ik}^\ominus \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial x_k}. \quad (3.18)$$

En supposant le même coefficient pour les deux niveaux de filtrage, cette relation établit un lien entre le vecteur de type Leonard $L_i = \widehat{\bar{u}_i \bar{\theta}} - \hat{u}_i \hat{\theta}$ pour le scalaire et le modèle à l'échelle du filtre test. Enfin, la valeur du coefficient dynamique est calculée par le produit scalaire avec les gradients de scalaire

résolu,

$$C = \frac{\left\langle L_i \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial x_i} \right\rangle}{\left\langle N_i \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial x_i} \right\rangle}, \quad (3.19)$$

où $N_i = \hat{\Delta}^2 \hat{S}_{ik}^{\ominus} \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial x_k}$ et $\langle \cdot \rangle$ est l'opérateur de moyenne dans les directions homogènes de l'écoulement. Le modèle *DRGM* est donc décrit par les équations (3.15) et (3.19). Les sections qui suivent détaillent les tests *a priori*, puis *a posteriori*, menés pour établir les performances de ce modèle dans sa forme définitive.

3.1.4 Examen *a priori* du modèle proposé : mesure des performances structurelles et fonctionnelles

Les tests *a priori* sont menés afin de mesurer la performance du modèle *DRGM* proposé en comparaison au modèle classique de diffusivité sous-maille *DSM* et au *GM* qui est le point de départ du *DRGM*. Cette dernière comparaison est intéressante car elle permet de mesurer l'amélioration des performances induite par la procédure de régularisation proposée. Les modèles sont comparés en terme de performances structurelles et fonctionnelles.

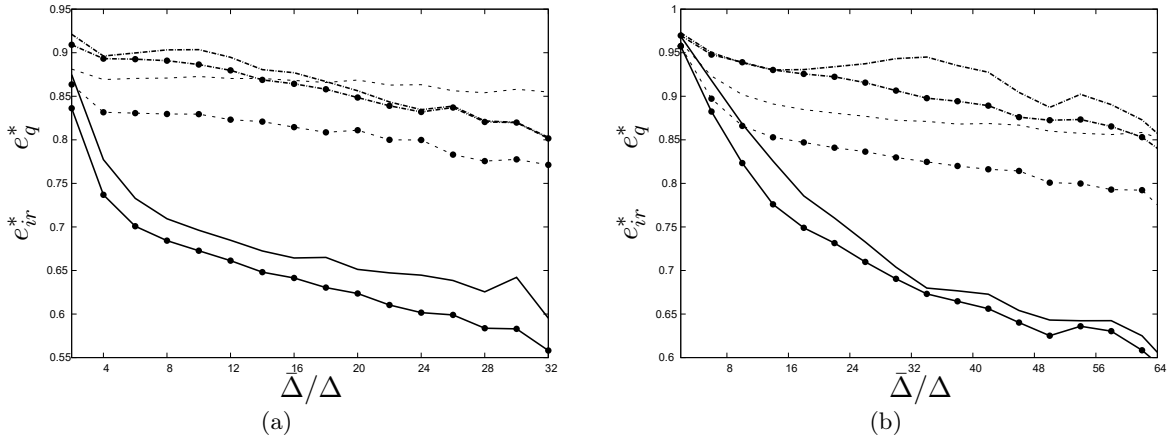


FIGURE 3.4 – Evolution des erreurs quadratiques des modèles *GM* (- - -), *DSM* (- - - -), *DRGM* (—) et de leurs erreurs irréductibles ($\bullet \cdot$) pour les bases de données $Re_\lambda = 160$, $Sc = 0.7$ (a) et $Re_\lambda = 90$, $Sc = 16$ (b)

La performance structurelle des modèles est mesurée par leurs erreurs quadratiques. L'erreur quadratique d'un modèle est également comparée à l'erreur irréductible du jeu de variables extrait de celui-ci (voir section 2.2 du chapitre 2). Il s'agit du second usage proposé par Moreau *et al.* [59] du concept d'estimateur optimal en SGE. En effet, dans la partie précédente (section 3.1.2), ce concept a été utilisé pour déterminer le jeu de variables le plus adapté au développement du modèle en comparant les erreurs irréductibles de différents jeux de variables. La comparaison de l'erreur quadratique du modèle avec son erreur irréductible renseigne sur la pertinence des procédures proposées (par exemple, la procédure dynamique) pour prédire le terme sous-maille à partir des variables sélectionnées.

L'évolution des erreurs quadratiques et irréductibles des différents modèles pour différentes tailles de filtre est présentée sur la figure 3.4. Les deux bases de données utilisées conduisent à des conclusions similaires. Ainsi, pour *DSM*, les erreurs quadratiques et irréductibles sont proches et relativement élevées. Cela confirme la mauvaise performance structurelle de *DSM* et son faible potentiel d'amélioration. L'erreur irréductible du jeu de variables du *GM* est plus faible que celle du jeu de variables du *DSM*, mais son erreur quadratique reste élevée et proche des erreurs calculées avec *DSM*. Finalement, le modèle *DRGM* conduit à une erreur quadratique nettement inférieure aux erreurs irréductibles des jeux de variables du *GM* et du *DSM*. Cela montre qu'aucun modèle basé sur les variables du *DSM* ou

du GM ne pourra conduire à des performances structurelles similaires. De plus, l'erreur quadratique du $DRGM$ reste proche de son erreur irréductible, confirmant la pertinence de la procédure dynamique utilisée.

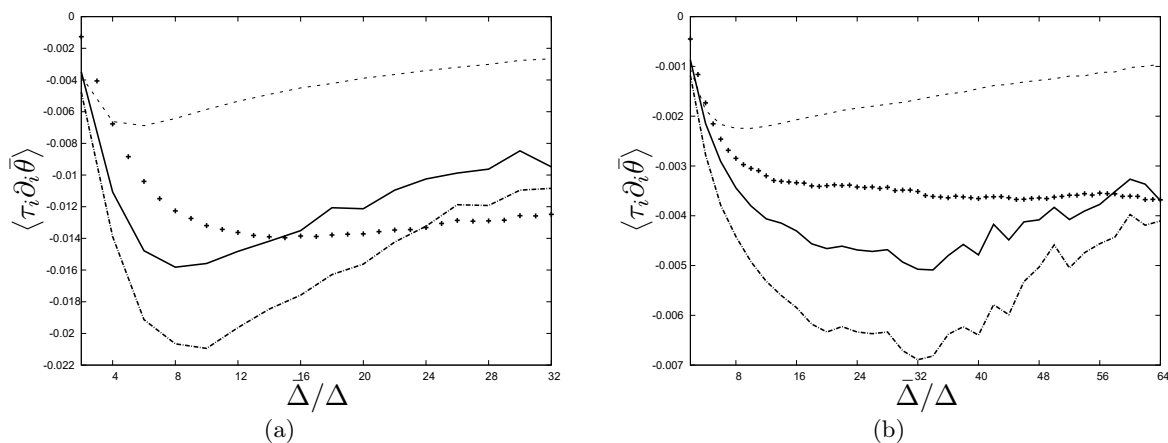


FIGURE 3.5 – Dissipations de la variance du scalaire sous-maille des modèles GM (- - -), DSM (-·-·-·-), $DRGM$ (—) en comparaison avec la dissipation sous-maille exacte de la SND filtrée (+ +), pour les bases de données $Re_\lambda = 160$, $Sc = 1$ (a) et $Re_\lambda = 90$, $Sc = 16$ (b)

La performance fonctionnelle des modèles est maintenant mesurée en comparant les dissipations sous-maille de variance du scalaire prédites par les différents modèles et par la SND filtrée. L'évolution des dissipations sous-maille en fonction de la taille de filtre est représentée sur la figure 3.5.

Alors que le modèle DSM apparaît globalement comme un modèle sur-dissipatif, le caractère instable du GM est retrouvé avec une forte sous-dissipation. L'augmentation du coefficient du modèle permettrait d'augmenter le niveau global de transfert, mais cela augmenterait également le niveau des transferts inverses locaux, ce qui maintiendrait le caractère instable des simulations. Finalement, le modèle $DRGM$ apparaît comme le modèle ayant la meilleure performance fonctionnelle, conduisant à la dissipation sous-maille la plus proche de la SND filtrée.

Sur les tests menés pour différentes longueurs de coupure et pour différents nombres de Schmidt moléculaire, le modèle $DRGM$ accroît sensiblement les performances du modèle GM dont il est issu. Il montre également de meilleures performances que DSM , tant d'un point de vue structurel que fonctionnel. Des tests *a posteriori* sont maintenant menés pour confirmer l'intérêt de ce modèle pour la réalisation de SGE du scalaire passif.

3.1.5 Tests *a posteriori*

Dans cette partie, le modèle $DRGM$ est testé dans des SGE. Il est comparé aux modèles DSM , GM et aux SND filtrées. Ces tests permettront de valider les performances mises en évidence dans les tests *a priori* précédents. Pour rendre les comparaisons des tests *a posteriori* pertinentes, l'évolution du scalaire passif doit directement traduire la performance du modèle sous-maille employé pour simuler son évolution. Cette contrainte est respectée en résolvant simultanément les SGE des scalaires passifs avec un champ de vitesse commun issu de SND. De plus, des interpolations spectrales permettent de discrétiser sans erreurs numériques le champ de vitesse sur les grilles de SGE. Par ce procédé, seules les erreurs de modélisations liées aux modèles sous-maille impactent les évolutions des scalaires.

Deux configurations de SGE sont considérées pour ces tests. La première est une décroissance de scalaire dans une THIF du champ de vitesse et la seconde est un jet temporel.

Décroissance scalaire

Nous allons effectuer des décroissances de scalaire dans des configurations de THIF du champ de vitesse avec un forçage de type Alvelius [1]. Les champs initiaux de vitesse sont statistiquement convergés à un régime de turbulence stationnaire et le champ de scalaire est initialisé aléatoirement selon la méthode d'Eswaran & Pope [28].

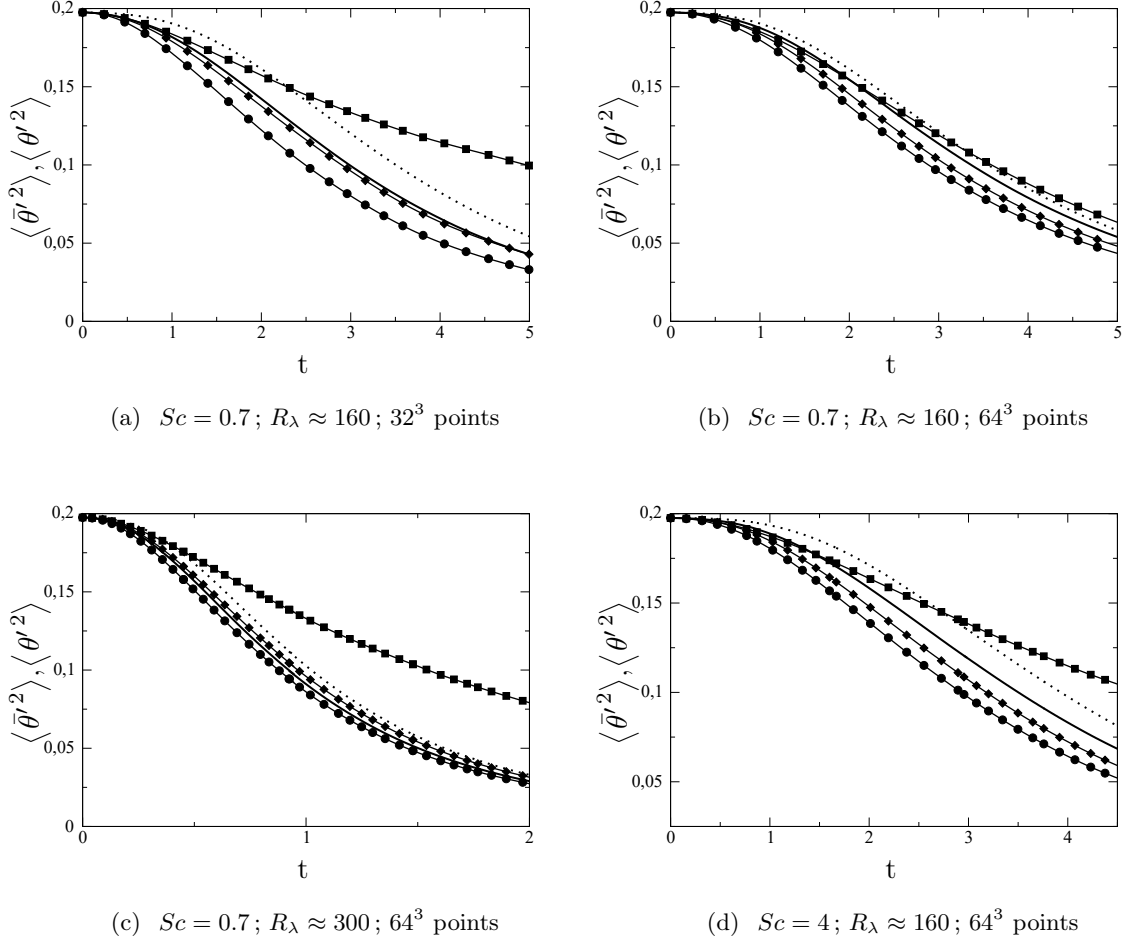


FIGURE 3.6 – Evolution des variances des scalaires résolus par SGE avec les modèles sous-maille *DSM* (\bullet), *DRGM* (\blacklozenge) et *GM* (\blacksquare) en comparaison avec la SVD filtrée (—) et la SVD (.....).

Ce cas de simulation est similaire à celui émulé à partir de la base de données des tests *a priori*. Avec cette configuration, nous allons faire varier plusieurs paramètres pour effectuer des tests de sensibilité des modèles à :

1. plusieurs niveaux de variance du scalaire résolu via deux résolutions de SGE à Re_λ et nombre de Schmidt fixés.
2. l'intensité de la turbulence via deux Re_λ .
3. des physiques de scalaire différentes via deux nombres de Schmidt moléculaires.

Dans le premier cas, les bases de données initiales sont identiques à celles utilisées pour les tests *a priori* de la partie précédente. Nous rappelons que le champ de vitesse est dans un régime de turbulence statistiquement stationnaire à un nombre de Reynolds basé sur la micro-échelle de Taylor de $Re_\lambda = 160$. Pour pouvoir évaluer les différents niveaux de variance du scalaire modélisé, les champs SGE de scalaire à nombre de Schmidt moléculaire de $Sc = 0.7$ sont résolus sur un maillage de 32^3 points et sur un maillage de 64^3 points.

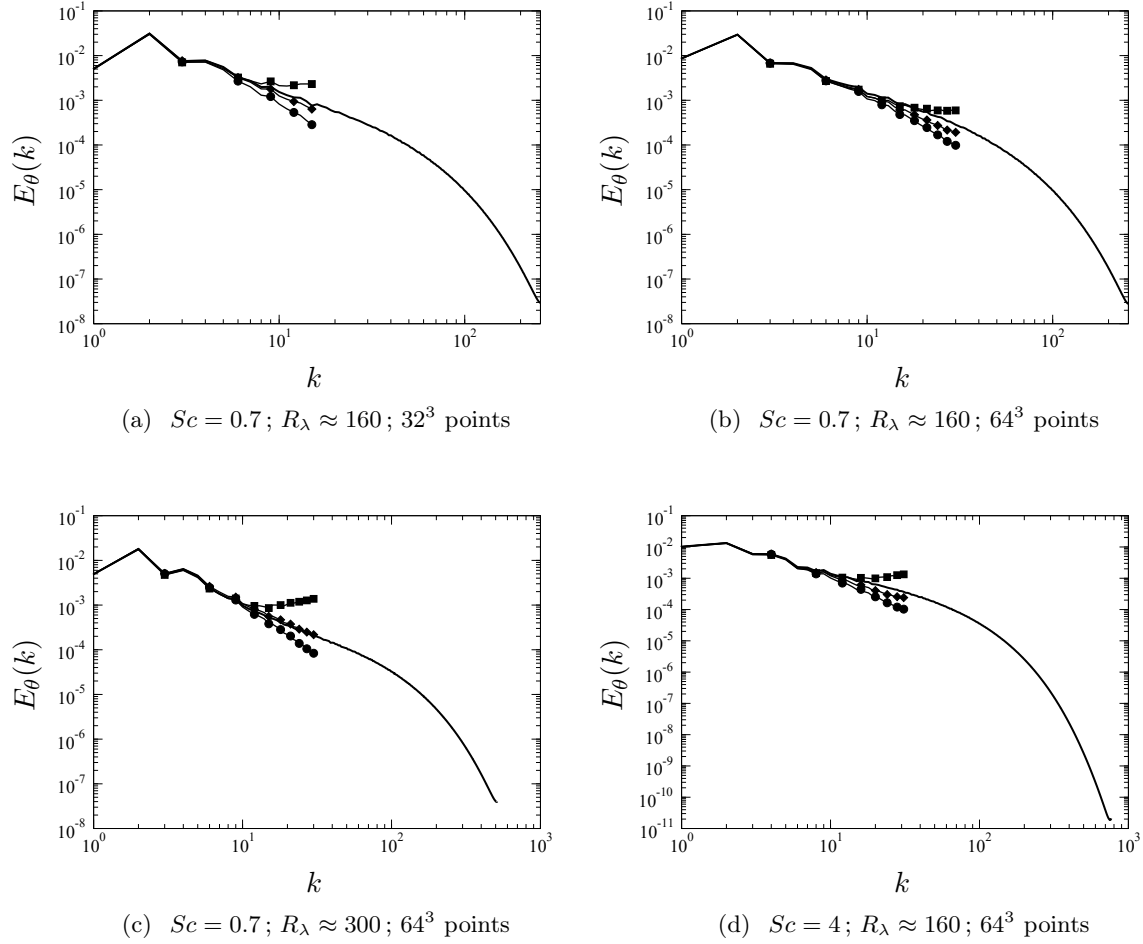


FIGURE 3.7 – Spectres des variances des scalaires résolus par SGE avec les modèles sous-maille *DSM* (\bullet), *DRGM* (\blacklozenge) et *GM* (\blacksquare) en comparaison avec le spectre de la variance du scalaire de la SND (—) à l’instant où $\langle \bar{\theta}'^2 \rangle^{SND} = 0.1$.

Dans le deuxième cas, le champ de vitesse SND sera résolu sur une grille de 1024^3 points avec un nombre de Reynolds basé sur la micro-échelle de Taylor de $Re_\lambda = 300$. Le champ de scalaire SND est également résolu sur une grille de 1024^3 points avec un nombre de Schmidt moléculaire de $Sc = 0.7$. Les SGE de scalaire sur cette configuration s’effectueront sur des grilles de 64^3 points.

Pour le troisième cas, les SGE sont menées avec un nombre de Schmidt moléculaire de $Sc = 4$ dans un champ de vitesse de $Re_\lambda = 160$ sur une grille de 512^3 points. Par conséquent le scalaire SND est résolu sur une grille de 1536^3 points afin de permettre la résolution de toutes les échelles du mélange.

La première série de conclusions des tests *a posteriori* sur ces configurations se fera sur les évolutions de la variance statistique de scalaire résolu $\langle \bar{\theta}'^2 \rangle$ représentées sur les figures 3.6. Les évolutions des variances scalaires des SGE sont comparées à celle de la SND filtrée et à celle de la SND $\langle \theta'^2 \rangle$ afin d’évaluer la part d’énergie du scalaire en sous maille. Sur ces résultats, nous vérifions bien que la variance des scalaires calculés à partir de la SND est toujours supérieure à celle des scalaires calculés à partir de la SND filtrée. Ces écarts de variance sont augmentés par la diminution de la résolution des SGE à nombre de Schmidt moléculaire fixé (figures 3.6(a) et 3.6(b)), ou par l’augmentation du nombre de Schmidt moléculaire à résolution de SGE fixée (figures 3.6(b) et 3.6(d)).

Dans les quatre configurations de SGE des scalaires, les mêmes conclusions peuvent être tirées. Le modèle *DSM* sous-estime la variance du scalaire résolu par rapport à la SND filtrée. Ce comportement a été mis en évidence lors des tests *a priori* de ce modèle qui montrent une sur-dissipation sous-maille.

A l'inverse, l'utilisation du *GM* conduit à la prédiction d'une variance scalaire supérieure à celle de la *SND* (non-filtrée). Cela traduit une accumulation non physique d'énergie aux petites échelles de la variance du scalaire résolu. Ce comportement est dû à une sous-prédiction des transferts sous-maille par rapport à la *SND* filtrée. Comme pressenti lors des tests *a priori*, *DRGM* corrige ce défaut du *GM* en prédisant une variance du scalaire résolu plus proche de la *SND* filtrée avec une légère sous-estimation. Malgré cette légère sous-estimation, la prédiction de la variance reste toujours supérieure à celle du *DSM*. Les spectres de variance des différents scalaires sont représentés sur la figure 3.7 à l'instant du mélange où la variance du scalaire de *SND* filtrée vaut $\langle \bar{\theta}'^2 \rangle = 0.1$. Ces résultats confirment les tendances des modèles déjà observées sur les évolutions de variance. Le modèle *GM* produit une sur-estimation de variance des petites échelles de scalaire résolu à cause d'une mauvaise prédiction des transferts. Le *DSM* sous-estime la variance du scalaire aux petites échelles à cause de sa sur-prédiction de dissipation sous-maille. Le *DRGM*, quant à lui, se rapproche de la *SND* tout en étant légèrement sous-prédictif. Notons que ces comportements ne sont pas influencés par les différents Re_λ et Sc choisis.

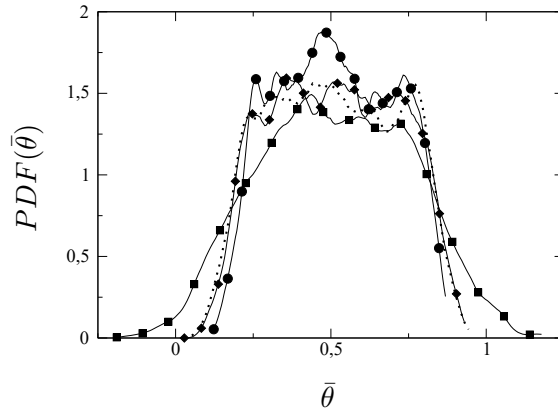


FIGURE 3.8 – Fonctions de densité de probabilité des scalaires résolus par SGE de résolution 32^3 points avec les modèles sous-maille *DSM* (\bullet), *DRGM* (\blacklozenge) et *GM* (\blacksquare) en comparaison avec la *SND* filtrée (\cdots) à l'instant où $\langle \bar{\theta}'^2 \rangle^{SND} = 0.1$.

Les fonctions de densité de probabilité des valeurs de scalaire résolu sont présentées sur la figure 3.8 au même instant que les spectres. Elles conduisent à des conclusions analogues sur le comportement des modèles. La sur-dissipation sous-maille du *DSM* se manifeste par la sous-prédiction des probabilités d'existence des valeurs de scalaire résolu au voisinage de 0 et 1 et une sur-prédiction de valeur autour de 0.5 (*i.e.* de scalaire mélangé). A l'inverse, la sous-prédiction de dissipation sous-maille du *GM* prédit des valeurs non physiques de scalaire (hors de l'intervalle $[0; 1]$), ce qui produit une probabilité excessive de valeurs au voisinage de 0 et 1. Enfin, *DRGM* se distingue des deux modèles en prédisant des valeurs de scalaire et des probabilités d'existence de celles-ci, en accord avec la *SND* filtrée.

Jet turbulent

Le second cas test est une configuration de jet temporel similaire à la configuration étudiée dans da Silva & Pereira [19]. Le domaine de calcul est périodique dans les trois directions et nous étudions l'évolution temporelle de l'écoulement générée par une initialisation de type jet plan. Les profils initiaux de vitesse et de scalaire sont décrits par une évolution en tangente hyperbolique [19]. Le nombre de Reynolds est fixé à $Re_H = (U_1 - U_2)H/\nu = 10^4$, où ν est la viscosité moléculaire du fluide, H est l'épaisseur initiale du profil du jet, U_1 est la vitesse initiale du jet et U_2 est la vitesse de l'écoulement co-courant. Le scalaire est initialisé à 1 dans le jet et à 0 ailleurs. Son nombre de Schmidt moléculaire est fixé à $Sc = 1$. Le domaine de calcul est de taille $(L_x, L_y, L_z) = (4H, 6H, 4H)$, avec x , y et z respectivement la direction principale de l'écoulement, la normale au plan du jet et son envergure. Pour la *SND*, la grille de résolution est de $(N_x, N_y, N_z) = (1024, 1536, 1024)$ afin de garder un maillage cartésien isotrope et de minimiser le confinement du développement spatial du jet. Une coupe du champ de scalaire résolu par *SND* est montrée à deux instants différents sur la figure 3.9. Le maillage des SGE

est de $(128, 192, 128)$ points. La comparaison entre le scalaire de la SND filtrée et les résultats de la SGE va permettre d'évaluer les capacités prédictives des modèles dans les zones de transition vers la turbulence et les zones de cisaillement.

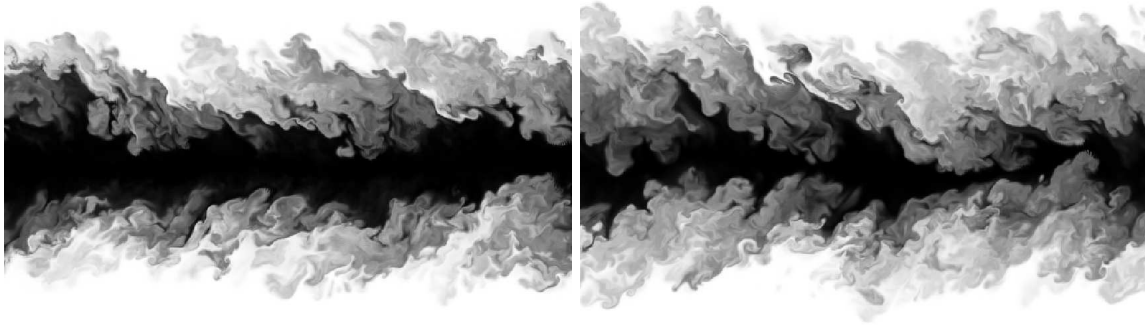


FIGURE 3.9 – Coupe du champ de scalaire de SND dans un plan (x, y) à deux instants de mélange. Le blanc représente la valeur nulle de scalaire et le noir la valeur unitaire.

Nous avons montré avec les tests *a posteriori* de décroissance de scalaire dans les THIF que le *DRGM* avait effectivement de bonnes performances, comme souligné auparavant dans les tests *a priori*. Pour confirmer les résultats des SGE en THIF, les SGE des scalaires passifs dans la configuration de jet temporel utilisant les modèles *GM*, *DSM* et *DRGM* sont effectuées. Pour les modèles dynamiques, les procédures de moyenne sont effectuées dans les plans de directions homogènes donc les plans (x, z) dans ce cas.

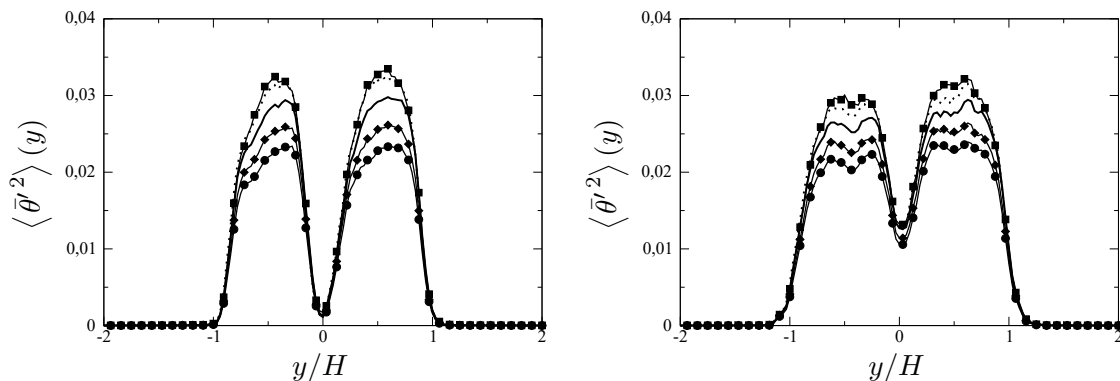


FIGURE 3.10 – Profils des variances des scalaires résolus avec les modèles *DSM* (\bullet), *DRGM* (\blacklozenge) et *GM* (\blacksquare) en comparaison avec la SND filtrée (—) et la SND (\cdots) pour deux instants différents du développement du jet.

Nous comparons les résultats des SGE et de la SND filtrée de deux instants pour illustrer les étapes de mélange dues aux tourbillons cohérents. Dans un premier temps, les tourbillons de Kelvin-Helmholtz dominent l'étape de transition. Ensuite des tourbillons longitudinaux apparaissent pour rendre l'écoulement pleinement tridimensionnel ce qui conduit à un développement de la turbulence en accord avec les scénarii classiques d'écoulement cisailé libre [10].

La figure 3.10 montre les profils de variance du scalaire résolu, dans les plans (x, z) , par les modèles sous-maille, la SND filtrée et la SND. Le maximum de variance du scalaire est atteint dans les plans $|y/H| = 0.5$ qui sont les lieux de cisaillement maximum où les deux zones d'écoulement se raccordent. Par la suite, la variance croît dans le plan $y/H = 0$, au milieu du jet, à cause de la fusion des deux

couches de mélange et du développement d'échelles turbulentes au coeur du jet (qualitativement visible sur la manière dont le champ de scalaire évolue sur les coupes de la figure 3.9). Dans cet écoulement, les performances des modèles sont similaires aux performances observées dans la THIF, à savoir :

- *DSM* est sur-dissipatif donc il sous-prédit la variance de scalaire résolu.
- *GM* est sous-dissipatif donc il sur-prédit la variance de scalaire résolu.
- *DRGM* corrige la sous-dissipation du *GM* et produit la variance du scalaire la plus proche de la SND filtrée.

Des statistiques supplémentaires sur les spectres en deux dimensions dans les plans $|y/H| = 0.5$, représentés sur la figure 3.11, confirment également le bon comportement du *DRGM*.

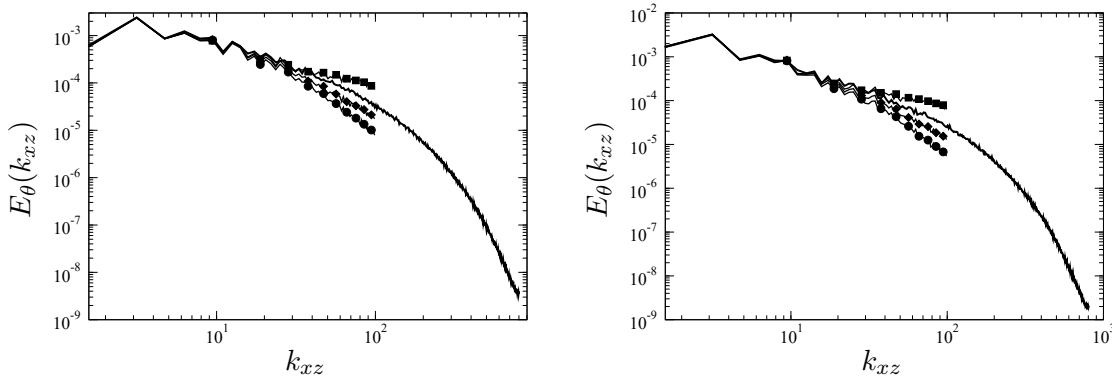


FIGURE 3.11 – Spectres de la variance des scalaires résolus avec les modèles *DSM* (\bullet), *DRGM* (\blacklozenge) et *GM* (\blacksquare) en comparaison avec la SND (—) pour deux instants différents du développement du jet dans les plans $|y/H| = 0.5$.

Conclusions sur le modèle du gradient régularisé du scalaire

La première partie de ces travaux sur la régularisation du modèle structural du gradient pour le scalaire passif, montre des améliorations fonctionnelles comme attendu, mais également des améliorations de performances structurales, comme l'ont montré les tests *a priori* et les tests *a posteriori*. Les performances mises en évidence justifient son appellation de modèle "structuro-fonctionnel". La procédure dynamique permet d'exploiter efficacement tout le potentiel de performance structurale de la forme régularisée du modèle. Elle participe également au bon ajustement de la dissipation sous-maille de la variance du scalaire résolu. Elle joue donc un rôle majeur dans le développement du *DRGM*.

Dans la partie suivante, nous allons appliquer cette procédure de régularisation au modèle sous-maille du gradient pour l'équation de quantité de mouvement filtrée. Le nouveau modèle obtenu sera également noté *DRGM*¹.

3.2 Régularisation du modèle du gradient pour la vitesse

Dans cette partie, nous proposons de régulariser le modèle du gradient pour la vitesse comme nous l'avons fait préalablement pour le *DRGM*^s. La première étape est la décomposition des gradients de vitesse par leurs parties symétrique et anti-symétrique respectivement les tenseurs des déformations et les tenseurs des rotations puis leur développement. Ces opérations vont produire plusieurs termes qui vont nous permettre d'alimenter une discussion conduisant à la régularisation du *GM*. Les propriétés de backscatter et de forwardscatter de chacun des termes, ainsi que leurs erreurs irréductibles vont permettre de sélectionner des termes importants pour les performances structurales et fonctionnelles

1. Au moment de différencier les modèles, nous noterons respectivement *MODELE*^v et *MODELE*^s les modèles pour la vitesse et le scalaire

du GM . A l'issue de cette sélection, deux modèles peuvent être proposés. Une procédure de calcul de coefficient dynamique est associée à chacun des modèles afin de leur conférer un bon niveau de dissipation sous-maille d'énergie cinétique et une bonne corrélation avec le terme exact. Une série de tests *a priori* est effectuée pour sélectionner le modèle offrant le meilleur compromis entre performance et simplicité. Enfin, des SGE du nouveau modèle seront effectuées dans trois configurations de simulation : une THI en décroissance, une THI forcée et un canal plan.

3.2.1 Régularisation fonctionnelle

La décomposition des deux gradients de vitesse résolue du tenseur sous-maille du GM de la relation (1.56) en partie symétrique et antisymétrique puis leurs développements mènent à la forme de décomposition tensorielle :

$$\tau_{ij}^{GM} = \frac{\bar{\Delta}^2}{12} (\bar{S}_{ik}\bar{S}_{jk} + \bar{\Omega}_{ik}\bar{S}_{jk} + \bar{S}_{ik}\bar{\Omega}_{jk} + \bar{\Omega}_{ik}\bar{\Omega}_{jk}). \quad (3.20)$$

A partir de cette expression, le premier terme $\bar{S}_{ik}\bar{S}_{jk}$ est décomposé en une partie positive et une partie négative

$$\bar{S}_{ij} = \bar{S}_{ij}^{\oplus} + \bar{S}_{ij}^{\ominus} \quad (3.21)$$

avec \bar{S}_{ij}^{\oplus} et \bar{S}_{ij}^{\ominus} définis par les relations (3.5) et (3.6). Ainsi le modèle devient la somme des termes :

$$\tau_{ij}^{GM} = \frac{\bar{\Delta}^2}{12} (\bar{S}_{ik}^{\oplus}\bar{S}_{jk} + \bar{S}_{ik}^{\ominus}\bar{S}_{jk} + \bar{S}_{ik}\bar{\Omega}_{jk} + \bar{\Omega}_{ik}\bar{S}_{jk} + \bar{\Omega}_{ik}\bar{\Omega}_{jk}). \quad (3.22)$$

Dans cette décomposition, seuls des termes aux propriétés analogues au terme sous-maille exact peuvent être considérés. Une des propriétés importantes abordée ici est la symétrie. Le dernier terme $\bar{\Omega}_{ik}\bar{\Omega}_{jk}$ de la relation (3.22) est bien symétrique. Les termes $\bar{S}_{ik}\bar{\Omega}_{jk} + \bar{\Omega}_{ik}\bar{S}_{jk}$ ne peuvent pas être dissociés pour conserver la symétrie. Pour les deux premiers termes de la relation (3.22), on remarque que :

$$\begin{aligned} \bar{S}_{ik}\bar{S}_{jk} &= \left(\sum_{l=1}^3 \lambda^{(l)} e_i^{(l)} e_k^{(l)} \right) \left(\sum_{m=1}^3 \lambda^{(m)} e_j^{(m)} e_k^{(m)} \right) \\ &= \sum_{l=1}^3 \sum_{m=1}^3 \lambda^{(l)} \lambda^{(m)} e_i^{(l)} e_j^{(m)} \underbrace{e_k^{(l)} e_k^{(m)}}_{\delta_{lm}} \\ &= \sum_{l=1}^3 \lambda^{(l)} \lambda^{(l)} e_i^{(l)} e_j^{(l)}, \end{aligned} \quad (3.23)$$

puisque les vecteurs propres forment une base orthonormée $e_k^{(i)} e_k^{(j)} = \delta_{ij}$. Cette réécriture de $\bar{S}_{ik}\bar{S}_{jk}$ nous montre que, quelle que soit la décomposition linéaire des valeurs propres $\lambda^{(l)}$ de \bar{S}_{ik} , la décomposition linéaire résultante de $\bar{S}_{ik}\bar{S}_{jk}$ sera formée de termes symétriques. Ainsi, la décomposition du modèle du gradient est bien une combinaison linéaire de 4 termes symétriques. L'objectif est désormais d'identifier les termes responsables du transfert inverse d'énergie cinétique de ce modèle (backscatter).

Un des points cruciaux dans la modélisation fonctionnelle des petites échelles de l'écoulement par un modèle sous-maille est de modéliser le bon niveau de transfert d'énergie cinétique résolue aux échelles sous-maille. De l'équation d'évolution de l'énergie cinétique résolue (1.47), et de l'équation de l'évolution de l'énergie cinétique sous-maille (1.48), il apparaît un terme commun $\tau_{ij}\bar{S}_{ij}$ [17, 71], caractérisant la dissipation sous-maille d'énergie cinétique résolue. Si ce terme est positif alors le modèle sous-maille sera responsable d'un transfert inverse, *i.e.* un transfert des échelles modélisées vers les échelles résolues (backscatter). Si ce terme est négatif, il agit comme un puits d'énergie cinétique résolue et par conséquent, l'énergie résolue cascade bien des échelles résolues vers les échelles modélisées (forwardscatter). Si le terme de transfert $\tau_{ij}\bar{S}_{ij}$ est réécrit avec le tenseur sous-maille du modèle du gradient décomposé en tenseurs des déformations et des rotations, tel que dans la relation (3.22), on

obtient :

$$\tau_{ij}^{GM} \bar{S}_{ij} = \frac{\bar{\Delta}^2}{12} \left(\bar{S}_{ik}^{\oplus} \bar{S}_{jk} \bar{S}_{ij} + \bar{S}_{ik}^{\ominus} \bar{S}_{jk} \bar{S}_{ij} + (\bar{S}_{ik} \bar{\Omega}_{jk} + \bar{\Omega}_{ik} \bar{S}_{jk}) \bar{S}_{ij} + \bar{\Omega}_{ik} \bar{\Omega}_{jk} \bar{S}_{ij} \right), \quad (3.24)$$

avec la convention de sommation sur les indices répétés toujours adoptée. Cette relation (3.24) inclut 4 termes dont les contributions à la dissipation sous-maille sont examinées individuellement. Les termes $\bar{S}_{ik} \bar{\Omega}_{jk} \bar{S}_{ij}$ et $\bar{\Omega}_{ik} \bar{S}_{jk} \bar{S}_{ij}$ sont tous les deux nuls, donc ils ne participent pas à la dissipation sous-maille. La réécriture de $\bar{S}_{ik}^{\oplus} \bar{S}_{jk} \bar{S}_{ij} + \bar{S}_{ik}^{\ominus} \bar{S}_{jk} \bar{S}_{ij}$ en utilisant l'expression (3.3) de façon similaire à la régularisation du modèle du gradient pour le scalaire (3.7), mène à l'expression simplifiée :

$$\begin{aligned} \bar{S}_{ik} \bar{S}_{jk} \bar{S}_{ij} &= \left(\sum_{l=1}^3 \lambda^{(l)} e_i^{(l)} e_k^{(l)} \right) \left(\sum_{m=1}^3 \lambda^{(m)} e_j^{(m)} e_k^{(m)} \right) \left(\sum_{n=1}^3 \lambda^{(n)} e_i^{(n)} e_j^{(n)} \right) \\ &= \sum_{l=1}^3 \sum_{m=1}^3 \sum_{n=1}^3 \lambda^{(l)} \lambda^{(m)} \lambda^{(n)} \underbrace{e_i^{(l)} e_i^{(n)}}_{\delta_{ln}} \underbrace{e_j^{(m)} e_j^{(n)}}_{\delta_{mn}} \underbrace{e_k^{(l)} e_k^{(m)}}_{\delta_{lm}} \\ \bar{S}_{ik} \bar{S}_{jk} \bar{S}_{ij} &= \sum_{l=1}^3 \lambda^{(l)} (\lambda^{(l)})^2. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Le signe de la dissipation sous-maille de l'énergie cinétique produite par ce terme peut être piloté par celui des valeurs propres $\lambda^{(k)}$ du premier tenseur des déformations. En procédant à la décomposition des valeurs propres positives (3.5) et négatives (3.6), de \bar{S}_{ik} nous obtenons les termes,

$$\bar{S}_{ik}^{\oplus} \bar{S}_{jk} \bar{S}_{ij} = \sum_{l=1}^3 \max(\lambda^{(l)}, 0) (\lambda^{(l)})^2 > 0, \quad (3.26)$$

et

$$\bar{S}_{ik}^{\ominus} \bar{S}_{jk} \bar{S}_{ij} = \sum_{l=1}^3 \min(\lambda^{(l)}, 0) (\lambda^{(l)})^2 < 0. \quad (3.27)$$

Donc $\bar{S}_{ik}^{\oplus} \bar{S}_{jk} \bar{S}_{ij}$ produit un transfert des échelles modélisées vers les échelles résolues et $\bar{S}_{ik}^{\ominus} \bar{S}_{jk} \bar{S}_{ij}$ de la dissipation directe des échelles résolues. Enfin le terme $\bar{\Omega}_{ik} \bar{\Omega}_{jk} \bar{S}_{ij}$ n'a pas une forme permettant de tirer de conclusions analytiques sur son signe. Une base de données a été utilisée pour calculer des valeurs de ce terme. Il s'agit d'une THI statistiquement stationnaire calculée sur une grille de 512^3 points à un $Re_{\lambda} = 160$. Un spectre de l'énergie cinétique instantanée de ce champ de vitesse est tracé sur la figure 2.2 du chapitre 2.

En émulant les grandeurs de SGE avec un filtre spectral, nous calculons *a priori* le terme $\bar{\Omega}_{ik} \bar{\Omega}_{jk} \bar{S}_{ij}$. Les fonctions de densité de probabilité de ce terme sont représentées sur la figure 3.12. Pour différentes tailles de filtre, le terme $\bar{\Omega}_{ik} \bar{\Omega}_{jk} \bar{S}_{ij}$ peut prendre des valeurs positives ou négatives. Il est donc localement responsable de transfert sous-maille direct et indirect pour *GM*.

Cette analyse montre que le mécanisme de dissipation sous-maille d'énergie cinétique du modèle du gradient se répartit comme,

$$\tau_{ij}^{GM} \bar{S}_{ij} = \frac{\bar{\Delta}^2}{12} \left(\underbrace{\bar{S}_{ik}^{\oplus} \bar{S}_{jk} \bar{S}_{ij}}_{>0} + \underbrace{\bar{S}_{ik}^{\ominus} \bar{S}_{jk} \bar{S}_{ij}}_{<0} + \underbrace{(\bar{S}_{ik} \bar{\Omega}_{jk} + \bar{\Omega}_{ik} \bar{S}_{jk}) \bar{S}_{ij}}_{=0} + \underbrace{\bar{\Omega}_{ik} \bar{\Omega}_{jk} \bar{S}_{ij}}_{\text{échanges bi-directionnels}} \right). \quad (3.28)$$

En conclusion, seuls les termes $\bar{S}_{ik}^{\oplus} \bar{S}_{jk}$ et $\bar{S}_{ik} \bar{\Omega}_{jk} + \bar{\Omega}_{ik} \bar{S}_{jk}$ sont conservés pour la suite du développement car ce sont les seuls qui ne sont pas responsables de transfert sous-maille inverse. Malgré les transferts inverses opérés par le modèle sous-maille exact, le choix de les supprimer de la régularisation nous permet de nous placer dans des conditions de capacités fonctionnelles similaires au *DSM*. Ce modèle ne produit en effet qu'un transfert direct d'énergie tant que le coefficient C_d de l'équation (1.52) reste positif [71].

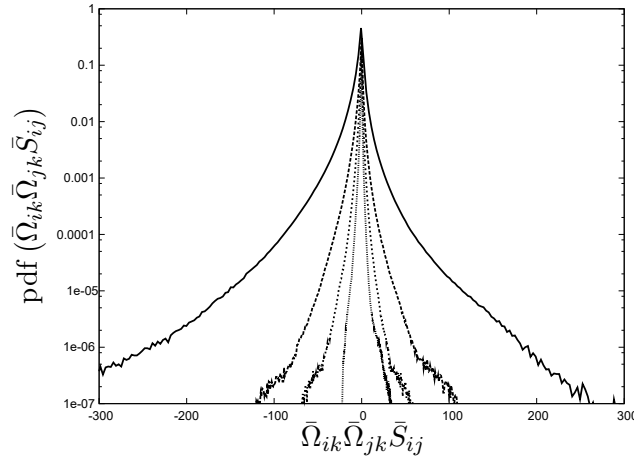


FIGURE 3.12 – Fonctions de densité de probabilité du terme $\bar{\Omega}_{ik}\bar{\Omega}_{jk}\bar{S}_{ij}$ pour différentes tailles de filtre, calculées *a priori* sur la base de données THI représentée par le spectre 2.2.

Dans la prochaine partie, nous allons utiliser la théorie de l'estimateur optimal pour discuter de la performance structurelle potentielle des termes $\bar{S}_{ik}^{\ominus}\bar{S}_{jk}$ et $\bar{S}_{ik}\bar{\Omega}_{jk} + \bar{\Omega}_{ik}\bar{S}_{jk}$. Nous verrons également quel impact la suppression des termes $\bar{S}_{ik}^{\oplus}\bar{S}_{jk}$ et $\bar{\Omega}_{ik}\bar{\Omega}_{jk}$ a sur cette performance. Les modèles issus de cette étape de régularisation sont notés *RGM*.

3.2.2 Régularisation structurelle

Cette étape de régularisation utilise la théorie de l'estimateur optimal comme évaluateur de performances. Les modèles *RGM* issus de la première étape de régularisation seront construits à partir des variables $\bar{S}_{ik}^{\ominus}\bar{S}_{jk}$ et $\bar{S}_{ik}\bar{\Omega}_{jk} + \bar{\Omega}_{ik}\bar{S}_{jk}$. Afin de construire un modèle sous-maille performant, les erreurs irréductibles de différents jeux de variables vont être évaluées sur la base de données SND du champ de vitesse de résolution 512^3 points. Le spectre de l'énergie cinétique de ce champ est représenté sur la figure 2.2. Le terme $\bar{S}_{ik}^{\ominus}\bar{S}_{jk}$ doit nécessairement être utilisé car il est le seul produisant de la dissipation sous-maille. Par conséquent les jeux de variables de conditionnement seront forcément formés de celui-ci pour calculer les erreurs irréductibles. Voici les expressions des jeux de variables retenus pour calculer les erreurs irréductibles associées aux modèles de type *RGM*² :

$$\phi_i^{RGM1} = \bar{\Delta}^2 \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{S}_{ik}^{\ominus}\bar{S}_{jk}), \quad (3.29a)$$

$$\{\phi_i\}^{RGM2} = \left\{ \bar{\Delta}^2 \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{S}_{ik}^{\ominus}\bar{S}_{jk}), \bar{\Delta}^2 \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{S}_{ik}\bar{\Omega}_{jk} + \bar{\Omega}_{ik}\bar{S}_{jk}) \right\}, \quad (3.29b)$$

et

$$\phi_i^{RGM3} = \bar{\Delta}^2 \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{S}_{ik}^{\ominus}\bar{S}_{jk} + \bar{S}_{ik}\bar{\Omega}_{jk} + \bar{\Omega}_{ik}\bar{S}_{jk}). \quad (3.29c)$$

Les erreurs irréductibles de ces jeux de variables seront comparées à celles calculées avec le jeu de variables du *GM* :

$$\phi_i^{GM} = \bar{\Delta}^2 \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_k} \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_k} \right), \quad (3.30)$$

et celles du jeu de variables du *DSM* :

$$\phi_i^{DSM} = \bar{\Delta}^2 \frac{\partial}{\partial x_j} (|\bar{S}| \bar{S}_{ij}). \quad (3.31)$$

2. En rappelant que l'erreur irréductible est calculée sur le terme $T_i = \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}$

Le calcul des erreurs irréductibles du vecteur de la divergence du tenseur sous-maille s'effectue par le calcul du carré de la norme L_2 du vecteur $T_i^{SND} - \langle T_i^{SND} | \phi_i^{Mod} \rangle$. La normalisation de cette erreur quadratique sera la norme L_1 du vecteur des variances des composantes de la divergence du tenseur sous-maille exact. La formulation de l'erreur irréductible normalisée du terme sous-maille exact T_i^{SND} par l'estimateur optimal d'un jeu de variables issu d'un modèle noté génériquement Mod , s'écrit :

$$e_{ir}^* = \frac{\sum_i \langle (T_i^{SND} - \langle T_i^{SND} | \phi_i^{Mod} \rangle)^2 \rangle}{\sum_i (\langle T_i^{SND2} \rangle - \langle T_i^{SND} \rangle^2)}. \quad (3.32)$$

Les erreurs quadratiques e_q^* seront calculées de façon similaire en remplaçant l'estimateur optimal par l'expression algébrique du modèle sous-maille à évaluer. Les cinq erreurs irréductibles sont représentées sur la figure 3.13. D'après le concept d'estimation optimale, ces erreurs mesurent l'erreur quadratique minimale atteignable par des modèles sous-maille construits avec ces jeux de variables. Comme utilisée précédemment dans la partie 3.1.2, cette mesure donne le potentiel structurel d'un jeu de variables.

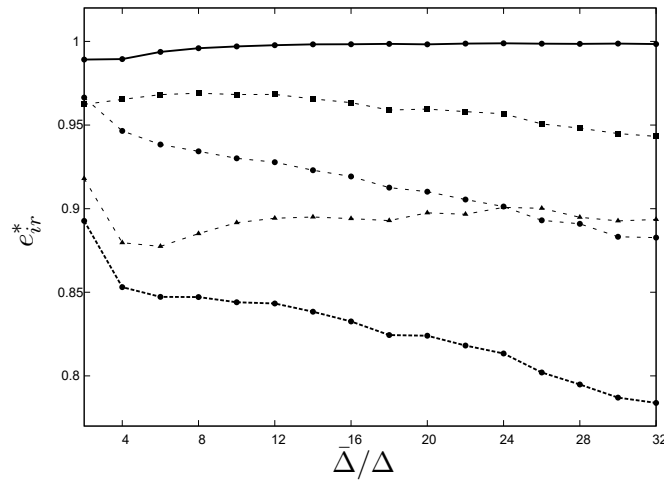


FIGURE 3.13 – Erreurs irréductibles e_{ir}^* des jeux de variables ϕ_i^{RGM1} (-●-), ϕ_i^{RGM2} (-●-), ϕ_i^{RGM3} (-●-), ϕ_i^{GM} (-▲-) et ϕ_i^{DSM} (-■-) en fonction de la taille de filtre $\bar{\Delta}/\Delta$.

La comparaison des erreurs irréductibles des jeux de variables des modèles DSM et GM confirment que ϕ_i^{GM} a de meilleures performances structurelles que ϕ_i^{DSM} comme évoqué dans l'introduction de cette partie. Les jeux de variables issus du RGM affichent des performances très hétérogènes.

Le jeu de variables ϕ_i^{RGM3} a une erreur irréductible supérieure à celle du jeu de variables ϕ_i^{DSM} . Il n'y a donc pas d'intérêt à construire un modèle régularisé avec le jeu de variables ϕ_i^{RGM3} .

Le calcul de l'erreur irréductible du jeu à deux variables $\{\phi_i\}^{RGM2}$ montre que la construction d'un modèle à deux coefficients dynamiques est la meilleure configuration à étudier pour avoir potentiellement la meilleure performance structurelle. Pour exploiter ce potentiel, il faut construire une procédure dynamique performante afin de faire tendre l'erreur quadratique du modèle τ_{ij}^{RGM2} vers son erreur irréductible. Tout comme la démarche entreprise pour le RGM scalaire, nous souhaitons construire un modèle algébrique simple synonyme de minimisation de temps de calcul.

Le jeu de variables ϕ_i^{RGM1} rassemble ces critères de simplicité et de performance. Il est constitué d'une seule variable et produit une erreur irréductible inférieure à celle du jeu de variables ϕ_i^{DSM} mais globalement supérieure à celle du jeu de variables GM . Il est à rappeler que dans le cas de la régularisation du GM^s , l'erreur irréductible du jeu de variables $DRGM^s$ était inférieure à celle du GM^s . Ce manque de performance structurelle du jeu de variables ϕ_i^{RGM1} peut donc encourager à l'utilisation du jeu de variables $\{\phi_i\}^{RGM2}$ et à l'emploi d'une procédure dynamique à deux coefficients, contrairement au cas du scalaire.

La conclusion de ces tests de potentiel de performance structurelle des jeux de variables conduit à

l'utilisation des jeux de variables ϕ_i^{RGM1} et $\{\phi_i\}^{RGM2}$. Ils aboutissent à la formulation :

— d'un modèle à coefficient unique

$$\boxed{\tau_{ij}^{RGM1} = C \hat{\Delta}^2 \bar{S}_{ik}^\ominus \bar{S}_{jk}}, \quad (3.33)$$

— d'un modèle à double coefficients

$$\boxed{\tau_{ij}^{RGM2} = C_1 \hat{\Delta}^2 \bar{S}_{ik}^\ominus \bar{S}_{jk} + C_2 \hat{\Delta}^2 (\bar{S}_{ik} \bar{\Omega}_{jk} + \bar{\Omega}_{ik} \bar{S}_{jk})}, \quad (3.34)$$

avec $C \geq 0$ et $C_1 \geq 0$ pour respecter le sens de la dissipation sous-maille.

3.2.3 Procédures de calcul de coefficient dynamique

Dans cette dernière partie de développement du modèle, des procédures de coefficients dynamiques sont adaptées aux modèles *RGM1* et *RGM2*. Dans un souci de clarté pour le lecteur, seules les procédures de calcul des coefficients dynamiques aboutissant à des résultats prometteurs sont explicitées dans le corps du document. D'autres voies ont été explorées et sont décrites dans l'annexe A.

Procédure dynamique à coefficient unique

Cette procédure est une adaptation de la procédure dynamique de Fabre & Balarac [29] pour les modèles issus de formulation à base d'un modèle du gradient. Son développement suit la même démarche que celle du *DRGM^s* qui aboutit à la relation (3.18). En repartant de l'équation (3.16) et en remplaçant $f = \bar{u}_i$ et $g = \bar{u}_j$, on peut écrire :

$$\widehat{\bar{u}_i \bar{u}_j} = \hat{u}_i \hat{u}_j + \frac{\hat{\Delta}^2}{12} \frac{\partial \hat{u}_i}{\partial x_k} \frac{\partial \hat{u}_j}{\partial x_k} + O(\hat{\Delta}^4). \quad (3.35)$$

Enfin, si on applique la décomposition de l'équation (3.22) en ne gardant que le terme de l'équation (3.33), on obtient une relation entre le tenseur de Leonard et le nouveau modèle au niveau de l'échelle de filtre test $\hat{\cdot}$

$$\widehat{\bar{u}_i \bar{u}_j} - \hat{u}_i \hat{u}_j = C \hat{\Delta}^2 \hat{S}_{ik}^\ominus \hat{S}_{jk} + O(\hat{\Delta}^4). \quad (3.36)$$

En négligeant les termes d'ordre supérieur à $O(\hat{\Delta}^2)$ et en supposant le coefficient constant en espace, l'expression du coefficient dynamique est obtenue en effectuant le produit scalaire avec le tenseur des contraintes filtrées à l'échelle du filtre test \hat{S}_{ij} ,

$$\boxed{C = \frac{\langle L_{ij} \hat{S}_{ij} \rangle}{\langle N_{ij} \hat{S}_{ij} \rangle}} \quad (3.37)$$

avec $N_{ij} = \hat{\Delta}^2 \hat{S}_{ik}^\ominus \hat{S}_{jk}$. La formulation du coefficient dynamique (3.37) et l'expression du modèle (3.33) définissent le modèle noté *DRGM* pour la vitesse.

Procédure dynamique à 2 coefficients

Parmi les différents tests réalisés, les meilleurs résultats ont été obtenus en partant de l'approximation suivante de la décomposition du tenseur de Leonard³

$$L_{ij} \approx C_1 \underbrace{\hat{\Delta}^2 \widehat{\bar{S}_{ik}^\ominus \bar{S}_{jk}}}_{Q_{ij}} + C_2 \hat{\Delta}^2 \underbrace{(\bar{S}_{ik} \bar{\Omega}_{jk} + \bar{\Omega}_{ik} \bar{S}_{jk})}_{R_{ij}}. \quad (3.38)$$

3. Cette approximation s'écarte des procédures dynamiques classiques et n'est justifiée que par les expériences numériques réalisées.

La méthode de calcul des moindres carrés de Lilly [51] sur cette dernière relation (3.38),

$$\frac{\partial}{\partial C_1} (L_{ij} - C_1 Q_{ij} - C_2 R_{ij})^2 = 0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial}{\partial C_2} (L_{ij} - C_1 Q_{ij} - C_2 R_{ij})^2 = 0, \quad (3.39)$$

conduit à résoudre le système,

$$U_{ik} V_k = W_i, \quad (3.40)$$

d'inconnue V_k avec

$$U_{ij} = \begin{pmatrix} Q_{kl} Q_{kl} & Q_{kl} R_{kl} \\ R_{kl} Q_{kl} & R_{kl} R_{kl} \end{pmatrix} \quad V_i = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad W_i = \begin{pmatrix} L_{kl} Q_{kl} \\ L_{kl} R_{kl} \end{pmatrix}. \quad (3.41)$$

Les solutions de ce système existent en tout point de l'espace car les termes du modèle *RGM2* sont inclus dans la décomposition polynomiale de Spencer & Rilvin [88] appliquée à \mathbf{S} et $\mathbf{\Omega}$, étudiée par Lund & Novikov [55]. Les termes de cette décomposition sont indépendants entre eux [76] donc les composantes de la matrice \mathbf{U} le sont aussi. Par conséquent, la matrice \mathbf{U} est toujours inversible et les solutions existent. Cette procédure de calcul des coefficients est similaire à celle utilisée par Wang *et al.* [96]. En faisant l'hypothèse de coefficients constants en espace, la résolution du système (3.40) en tous points de l'espace revient maintenant à la résolution du seul système,

$$\langle U_{ik} \rangle V_k = \langle W_i \rangle, \quad (3.42)$$

où l'opérateur de moyenne est appliqué dans les directions homogènes de l'écoulement. L'inversion de la matrice $\langle \mathbf{U} \rangle$ conduit à l'expression des coefficients :

$$\boxed{C_1 = \frac{\langle L_1 \rangle \langle U_{22} \rangle - \langle L_2 \rangle \langle U_{12} \rangle}{\langle U_{11} \rangle \langle U_{22} \rangle - \langle U_{12} \rangle^2} \quad C_2 = \frac{\langle L_2 \rangle \langle U_{11} \rangle - \langle L_1 \rangle \langle U_{12} \rangle}{\langle U_{11} \rangle \langle U_{22} \rangle - \langle U_{12} \rangle^2}} \quad (3.43)$$

La formulation de coefficient dynamique (3.43) et l'expression du modèle *RGM2* (3.34) conduisent à la définition du modèle noté *MRGM* pour Mixed Regularized Gradient Model.

Les procédures de calcul de coefficients dynamiques pour les formulations *RGM1* et *RGM2* aboutissent respectivement à la création des modèles *DRGM* et *MRGM*. Ces modèles vont maintenant être testés *a priori* pour examiner leurs performances structurelles et fonctionnelles.

3.2.4 Tests *a priori* des modèles régularisés

Pour valider ces modèles, nous allons les tester *a priori* sur la base de données SND de $Re_\lambda = 160$. De nouveau, nous allons évaluer les performances structurelles et fonctionnelles des modèles construits. Sur la figure 3.14 sont représentées les erreurs quadratiques et irréductibles des modèles *GM*, *DSM*, *DRGM* et *MRGM* où nous retrouvons parmi celles-ci, les erreurs irréductibles de la figure 3.13.

L'écart entre l'erreur quadratique d'un modèle et son erreur irréductible est essentiellement due au coefficient : dynamique pour *DSM*, *DRGM* et *MRGM*, statique pour *GM*. Puisque les erreurs quadratiques des modèles *DSM* et *DRGM* sont proches de leurs erreurs irréductibles, on en déduit que leurs procédures dynamiques sont assez bien adaptées. Comme attendu, *DSM* a l'erreur quadratique la plus élevée. La performance structurelle de *DRGM* est meilleure que celle de *DSM* mais globalement moins bonne que celle de *GM*. La régularisation de GM^v s'est avérée moins immédiate que celle du GM^s . Dans le cas du scalaire, la formulation à deux coefficients avait pu être écartée dans la mesure où les performances structurelles de $DRGM^s$ étaient meilleures que celle de GM^s . Le manque de performances structurelles de $DRGM^v$ par rapport à GM^v constitue un point faible pour cette régularisation et justifie que nous étudions le *MRGM*.

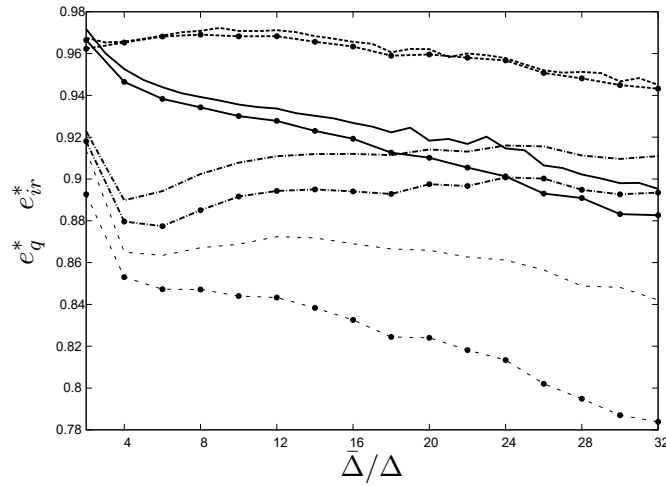


FIGURE 3.14 – Erreurs irréductibles e_{ir}^* ($\bullet \bullet$) et quadratique e_q^* des modèles *GM* (-----), *DRGM* (—), *MRGM* (- - -) et *DSM* (-----) en fonction de la taille de filtre $\bar{\Delta}/\Delta$

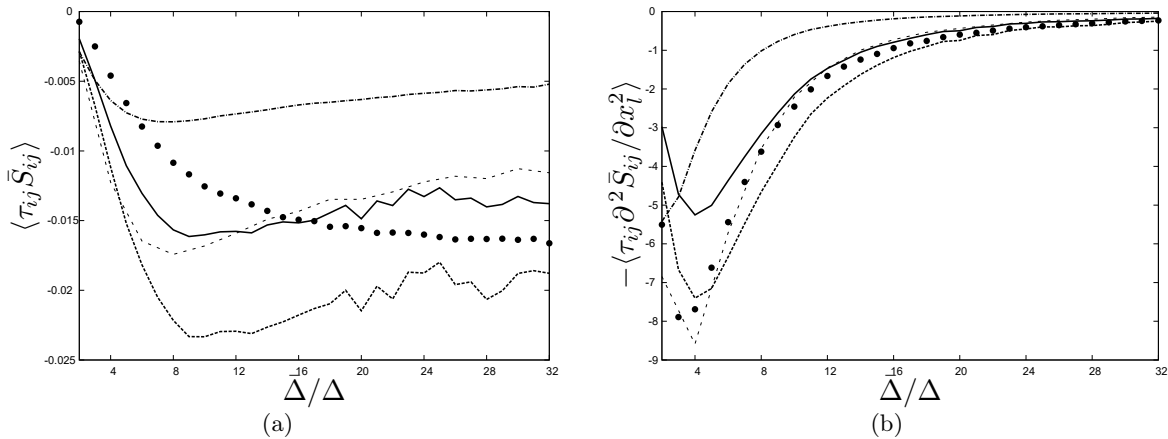


FIGURE 3.15 – Dissipations sous-maillage d'énergie cinétique (a) et d'entrophie (b) des modèles *GM* (-----), *DRGM* (—), *MRGM* (- - -) et *DSM* (-----) en comparaison avec la dissipation sous-maillage de la SND filtrée ($\bullet \bullet$) en fonction de la taille de filtre.

La procédure de calcul de coefficients dynamiques du *MRGM* lui permet d'avoir une erreur quadratique suffisamment proche de l'erreur irréductible du jeu de variables $\{\phi_i\}^{RGM2}$ pour obtenir l'erreur quadratique la plus faible. Malgré la marge d'amélioration pour se rapprocher de son erreur irréductible, ce modèle a donc la meilleure performance structurelle au point d'apporter une réelle amélioration par rapport à *GM*.

Pour analyser les performances fonctionnelles, le niveau de dissipation sous-maillage d'énergie cinétique $\langle \tau_{ij} \bar{S}_{ij} \rangle$ est représenté sur la figure 3.15(a). Il est également intéressant de regarder le niveau de dissipation sous-maillage d'entrophie [18]. Pour faire apparaître ce terme, il faut écrire les équations d'évolution de l'entrophie résolue $2\Omega = \langle \bar{\omega}_i \bar{\omega}_i \rangle$

$$\frac{\partial \Omega}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \Omega}{\partial x_j} = \bar{\omega}_i \bar{\omega}_j \bar{S}_{ij} + \nu \left[\frac{\partial^2 \Omega}{\partial x_j \partial x_j} - \frac{\partial \bar{\omega}_i}{\partial x_j} \frac{\partial \bar{\omega}_i}{\partial x_j} \right] - \bar{\omega}_i \epsilon_{ijk} \frac{\partial^2 \tau_{kl}}{\partial x_j \partial x_l}, \quad (3.44)$$

et de l'enstrophie sous-maille $2\Omega_{SGS} = \overline{\omega_i \omega_i} - \bar{\omega}_i \bar{\omega}_i$

$$\frac{\partial \Omega_{SGS}}{\partial t} + u_j \frac{\partial \Omega_{SGS}}{\partial x_j} = \overline{\omega_i \omega_j S_{ij}} - \bar{\omega}_i \bar{\omega}_j \bar{S}_{ij} + \nu \frac{\partial^2 \Omega_{SGS}}{\partial x_j \partial x_j} - \nu \left[\frac{\partial \omega_i}{\partial x_j} \frac{\partial \omega_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{\omega}_i}{\partial x_j} \frac{\partial \bar{\omega}_i}{\partial x_j} \right] - \frac{1}{2} [\overline{u_j \omega_i \omega_i} - \bar{u}_j \bar{\omega}_i \bar{\omega}_i] + \bar{\omega}_i \epsilon_{ijk} \frac{\partial^2 \tau_{kl}}{\partial x_j \partial x_l}. \quad (3.45)$$

Le dernier terme des deux membres de droite est semblable dans les deux équations au signe près et est donc bien un terme d'échange. Ce terme de transfert entre l'enstrophie résolue et l'enstrophie sous-maille peut se décomposer en une partie diffusive et une partie dissipative [18] :

$$\bar{\omega}_i \epsilon_{ijk} \frac{\partial^2 \tau_{kl}}{\partial x_j \partial x_l} = \tau_{ij} \frac{\partial^2 \bar{S}_{ij}}{\partial x_l^2} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\omega}_j \epsilon_{ijk} \frac{\partial \tau_{lk}}{\partial x_l} - \tau_{il} \epsilon_{ljk} \frac{\partial \bar{\omega}_k}{\partial x_j} \right). \quad (3.46)$$

Donc la dissipation sous-maille d'enstrophie est pilotée par le terme $\tau_{ij} \partial^2 \bar{S}_{ij} / \partial x_l^2$. Da Silva *et al.* [18] montrent que la dissipation sous-maille d'enstrophie est déterminante lorsque le filtrage implicite de SGE est placé dans la zone inertielle du spectre de l'énergie cinétique car, à ces échelles, ce sont les termes de production et de dissipation sous-maille qui dominent les transferts. Par conséquent, la dissipation sous-maille d'enstrophie est une grandeur d'intérêt pour les modèles sous-maille de la vitesse.

Dans les figures 3.15 sont représentés les niveaux de dissipation sous-maille d'énergie cinétique (3.15(a)) et d'enstrophie (3.15(b)). Les modèles *DRGM* et *MRGM* se rapprochent des transferts sous-maille exacts de la SND filtrée ce qui leur confère de meilleures performances fonctionnelles que les modèles *DSM* et *GM* pour les tailles de filtre $\bar{\Delta} / \Delta > 5$. Le modèle *DRGM* a un niveau de dissipation sous-maille d'énergie cinétique prédisant de la sur-dissipation jusqu'à $\bar{\Delta} / \Delta = 16$. Par contre il prédit un transfert sous-maille de l'enstrophie légèrement sous-estimé par rapport à la SND filtrée. Le modèle *MRGM* se distingue par sa prédiction de dissipation sous-maille d'enstrophie pour $\bar{\Delta} / \Delta < 14$. Par contre, dans la même gamme de taille de filtre, ce modèle produit *a priori* plus de dissipation sous-maille d'énergie cinétique que *DRGM* et *DSM* pour $\bar{\Delta} / \Delta < 5$.

Deux modèles sous-maille, *DRGM* et *MRGM* ont été construits avec des spécificités particulières pour chacun. Les performances fonctionnelles sont dominées par *DRGM* pour le transfert d'énergie cinétique sous-maille et par *MRGM* pour la dissipation sous-maille d'enstrophie. *MRGM* produit les meilleures performances structurelles. Enfin, *DRGM* a de meilleures performances structurelles que *DSM* et que *GM* pour les grandes tailles de filtre.

Nous choisissons de ne conserver que le *DRGM* pour mener des tests *a posteriori* en raison de ses performances fonctionnelles sur la dissipation sous-maille d'énergie cinétique et de sa simplicité algébrique, relativement au modèle *MRGM*.

DRGM a été testé *a priori* sur une base de données de THI. Les propriétés de son opérateur différentiel sont examinées dans l'annexe B pour comprendre notamment, comment il se comporte dans des configurations d'écoulement canonique.

Dans la suite, nous allons évaluer le modèle *DRGM* sur des tests *a posteriori* pour valider ses aptitudes en tant que modèle sous-maille, toujours en comparaison avec les modèles *DSM* et *GM*.

3.2.5 Tests *a posteriori* du modèle régularisé pour la vitesse

Le premier cas est une THI en décroissance et le deuxième est une configuration de THI forcée. Ces deux simulations sont effectuées à partir du filtrage du même champ de vitesse de THI utilisé lors du test *a priori*. Cette base de données a un nombre de Reynolds basé sur la micro-échelle de Taylor $Re_\lambda = 160$ sur une grille de 512^3 points. De ce champ de THI statistiquement convergé, un filtre de type spectral est utilisé pour créer deux champs de résolution 32^3 et 64^3 points. Ces résolutions de

SGE représentent des filtrages implicites de longueurs de coupure $\bar{\Delta}/\Delta = 8$ et 16. Le spectre d'énergie cinétique du champ de SND à l'instant du démarrage de ces deux configurations de SGE est représenté sur la figure 2.2. Dans ces deux cas de SGE, l'évolution temporelle est normalisée par la longueur intégrale divisée par l'écart type de la vitesse résolue $t^* = t\bar{u}_{rms}/l_{int}$. Les trois SGE effectuées avec les modèles *DRGM*, *DSM* et *GM* seront comparées aux résultats de la SND filtrée. Le troisième cas test *a posteriori* est un canal plan dont les caractéristiques seront présentées par la suite.

Turbulence homogène isotrope en décroissance

Pour évaluer les modèles sous-maille, l'énergie cinétique résolue et l'enstrophie résolue sont examinées. L'enstrophie résolue est une statistique qui met l'accent sur les comportements énergétiques des grands nombres d'onde de la SGE et par conséquent sur la zone du spectre où le modèle sous-maille agit de façon prépondérante [38, 82]. Pour chacune de ces quantités, leur suivi temporel ainsi que leur dissipation sous-maille sont étudiés. Enfin les spectres instantanés à $t^* = 1$ de l'énergie cinétique montrent en détail l'influence du modèle sur les champs de vitesse. L'analyse des résultats est organisée comme suit : les modèles sous-maille sont discutés séquentiellement, les résultats sur l'énergie cinétique sont évalués pour chacune des simulations puis l'enstrophie est évaluée à son tour.

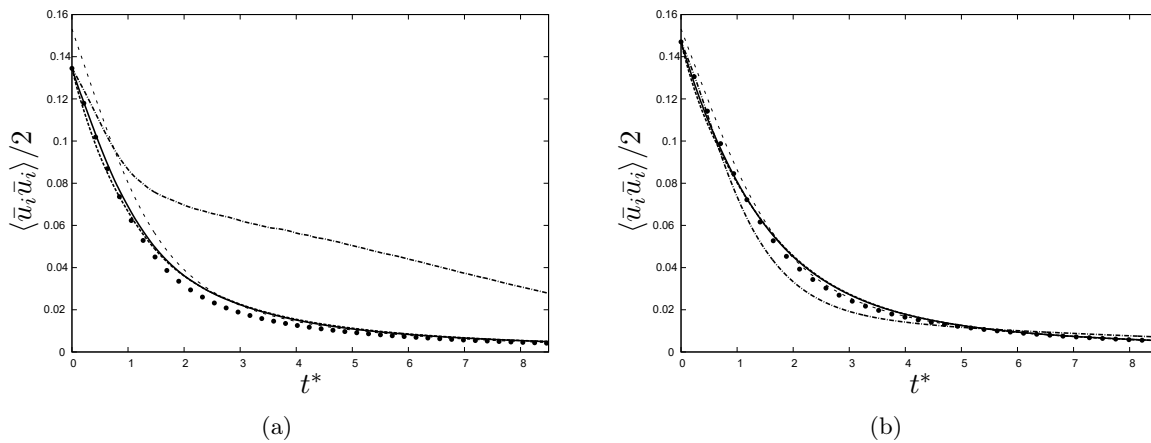


FIGURE 3.16 – Evolution de l'énergie cinétique résolue des champs de vitesse de la décroissance avec les modèles sous-maille *DSM* (-----), *DRGM* (—), *GM* (-·-·-) en comparaison avec la SND (- - -) et la SND filtrée ($\bullet \bullet$) pour les résolutions de 32^3 (a) et 64^3 (b).

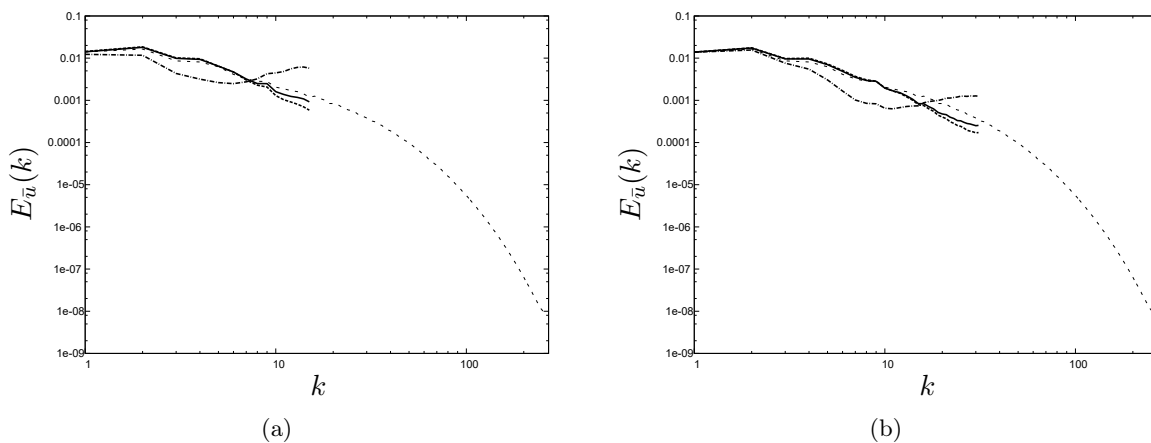


FIGURE 3.17 – Spectres d'énergie cinétique des champs de vitesse de la décroissance avec les modèles sous-maille *DSM* (-----), *DRGM* (—), *GM* (-·-·-) en comparaison avec la SND (- - -) pour les résolutions de 32^3 (a) et 64^3 (b) à l'instant $t^* = 1$.

L'évolution de l'énergie cinétique lors de la décroissance des champs de vitesse résolus en SGE par les

modèles sous-maille est représentée sur les figures 3.16. Les SGE résolues sur une grille de 32^3 points sont représentées sur la figure 3.16(a) et celles de 64^3 points sont sur la figure 3.16(b). Parallèlement à l'énergie cinétique, la dissipation sous-maille des modèles pour les SGE de 32^3 et 64^3 points sont sur les figures 3.18(a) et 3.18(b). Enfin, les spectres de l'énergie cinétique à l'instant $t^* = 1$ sont représentés sur les figures 3.17.

Le modèle sous-maille *GM* est connu pour ses instabilités dues aux transferts inverses d'énergie cinétique sous-maille. Cette caractéristique se manifeste sur la SGE de 32^3 par une sur-prédiction du niveau d'énergie cinétique résolue dépassant le niveau d'énergie cinétique de la SND (non filtrée). Sur la SGE de 64^3 , *GM* prédit correctement le niveau d'énergie cinétique résolue. Cette estimation est artificiellement correcte car le spectre de l'énergie cinétique du champ de vitesse prédit par ce modèle à cette résolution (3.17(b)) montre une accumulation d'énergie aux échelles voisines de la plus petite échelle résolue. Ces résultats sont en accord avec les résultats *a priori* du *GM*, à savoir, sa sous-prédiction de dissipation sous-maille d'énergie cinétique, figure 3.15(a), pour les longueurs de coupure $\bar{\Delta}/\Delta > 6$. Les résultats de l'évolution de l'énergie cinétique résolue sont étayés par les valeurs de la dissipation sous-maille de l'énergie cinétique du champ de vitesse modélisé par *GM* au cours de la décroissance, représentée sur la figure 3.18. Dans les deux cas de résolution, *GM* commence par sous-prédire la dissipation sous-maille d'énergie cinétique, puis il tend rapidement à effectuer du transfert inverse. Ces résultats sont également en accord avec la littérature [54, 94].

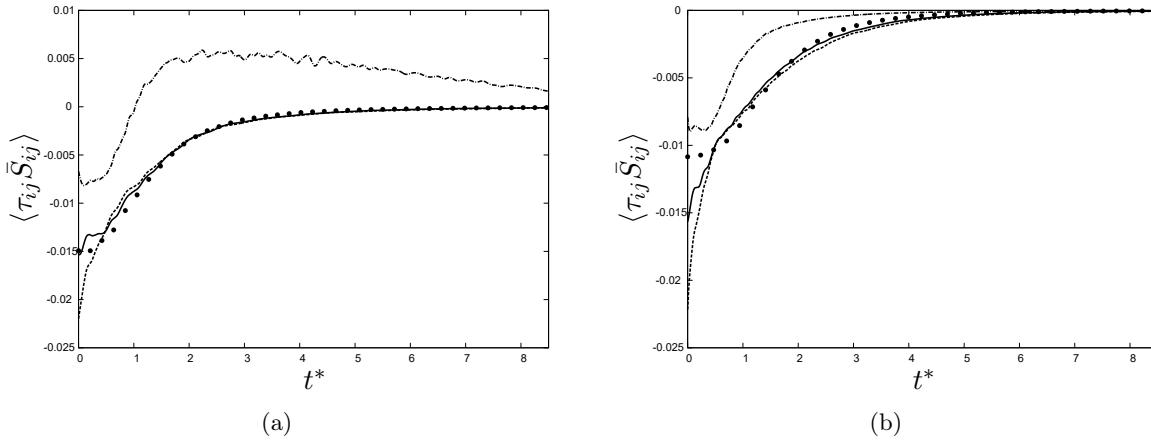


FIGURE 3.18 – Evolution de la dissipation sous-maille d'énergie cinétique des modèles *DSM* (.....), *DRGM* (—), *GM* (-----) en comparaison avec la SND filtrée (• •) pour les résolutions de 32^3 (a) et 64^3 (b).

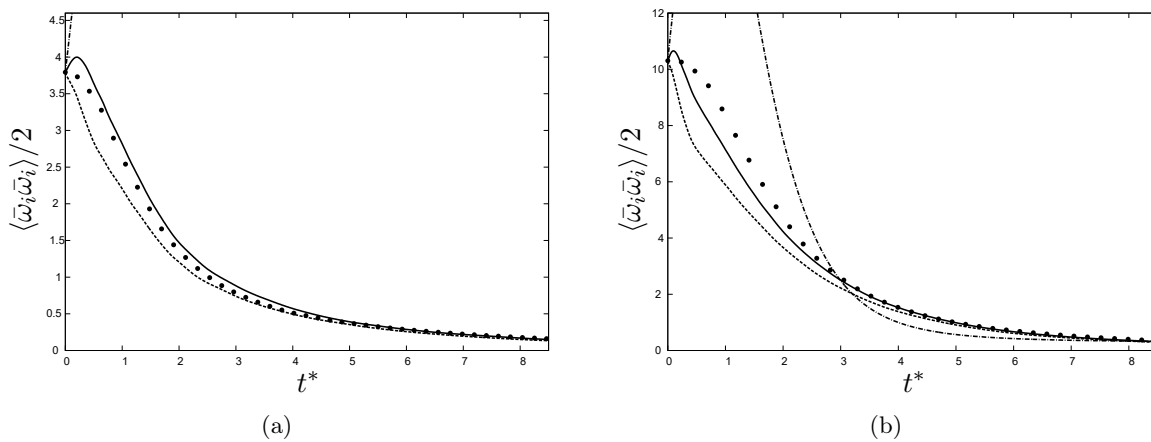


FIGURE 3.19 – Evolution de l'enstrophie résolue des champs de vorticit  de la THI en d croissance avec les mod les sous-maille *DSM* (-----), *DRGM* (—), *GM* (-----) en comparaison avec la SND filtr e (• •) pour les r solutions de 32^3 (a) et 64^3 (b).

Le modèle *DSM* affiche une évolution de l'énergie cinétique résolue de son champ de vitesse très comparable à la *SND* filtrée (figure 3.16). Cependant une sur-prédiction en début de simulation est visible sur l'évolution de sa dissipation sous-maille d'énergie cinétique (figure 3.18) allant jusqu'à surévaluer deux fois plus le transfert exact de la *SND* filtrée, figure 3.18(b). Au cours de la décroissance, le spectre de l'énergie cinétique du champ de vitesse *DSM* montre une sous-prédiction aux petites échelles résolues. Encore une fois, ces résultats *a posteriori* sont en accord avec les résultats *a priori* obtenus plus haut et reflètent le caractère sur-dissipatif du *DSM*, en dépit de la procédure de coefficient dynamique de Germano *et al.* [33] améliorée par Lilly [51].

Enfin, le modèle traitant au mieux l'évolution de l'énergie cinétique résolue est *DRGM* qui, comme *DSM*, a une évolution comparable à celle de la *SND* filtrée mais sans la sous-prédiction au début de la simulation (figure 3.16). La meilleure modélisation de l'énergie cinétique s'explique par sa meilleure prédiction de dissipation sous-maille, figure 3.18, qui est en meilleure adéquation avec la *SND* filtrée. L'évolution de l'enstrophie résolue $2\bar{\Omega} = \langle \bar{\omega}_i \bar{\omega}_i \rangle$, (figure 3.19) et de sa dissipation sous-maille, (figure 3.20) pour différentes SGE est maintenant analysée. Cela permet d'étudier la sensibilité des modèles pour les plus petites échelles résolues.

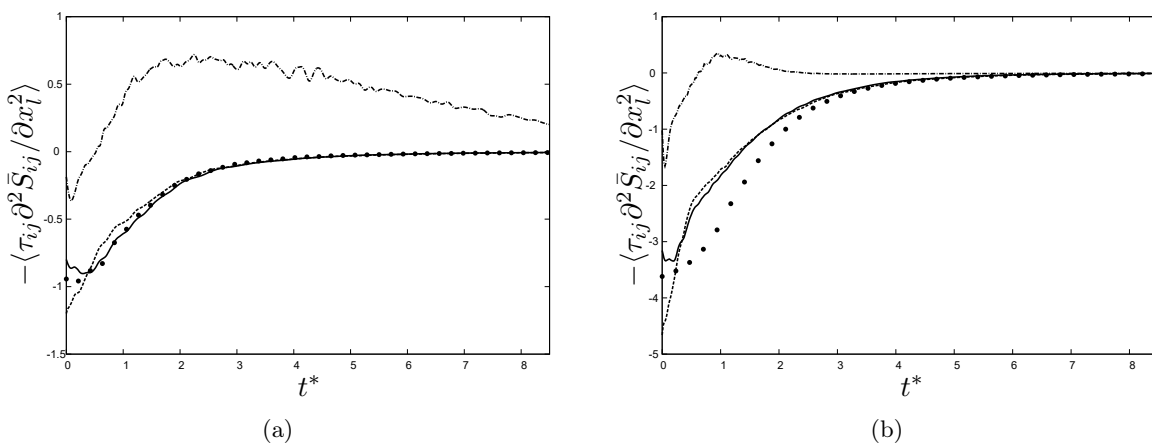


FIGURE 3.20 – Evolution de la dissipation sous-maille d'enstrophie des modèles *DSM* (-----), *DRGM* (—), *GM* (.....) en comparaison avec la *SND* filtrée (••) pour les résolutions de 32^3 (a) et 64^3 (b).

Les résultats obtenus confirment ceux sur l'énergie cinétique résolue mais avec une plus grande netteté encore. L'enstrophie résolue du champ de vorticit  de *GM* montre une telle sur-pr diction que la monotonie de son  volution est invers e par rapport   celle pr dite par la *SND* filtr e. Le *DSM*, quant   lui, dissipe tr s rapidement l'enstrophie   cause de sa forte sur-pr diction de dissipation   l' tat initial (figure 3.20). Enfin, le mod le *DRGM* montre une tr s l g re sur-pr diction en d but de simulation comme l'a montr  le test *a priori*, mais l' volution de son enstrophie est la plus proche de la *SND* filtr e.

Turbulence homog ne isotrope forc e

Le cas instationnaire de d croissance illustre les am liorations du processus de r gularisation du *GM*. Nous allons maintenant effectuer un deuxi me cas de SGE avec un for age de type Alvelius [1] pour confirmer les bonnes performances de *DRGM* dans une simulation statistiquement stationnaire. L' tat initial de ces SGE est le m me que celui du test *a posteriori* pr c dent. Sur la figure 3.21, nous avons choisi de tracer les quantit s discriminantes pour *GM*. La SGE de 32^3 n cessite un niveau de mod lisation de l' nergie cin tique sous-maille, figure 3.21(a), assez  lev . Cela permet de mettre *GM* en d faut et de constater son instabilit , pendant qu'aux m mes instants, *DSM* et *DRGM* sont stables.

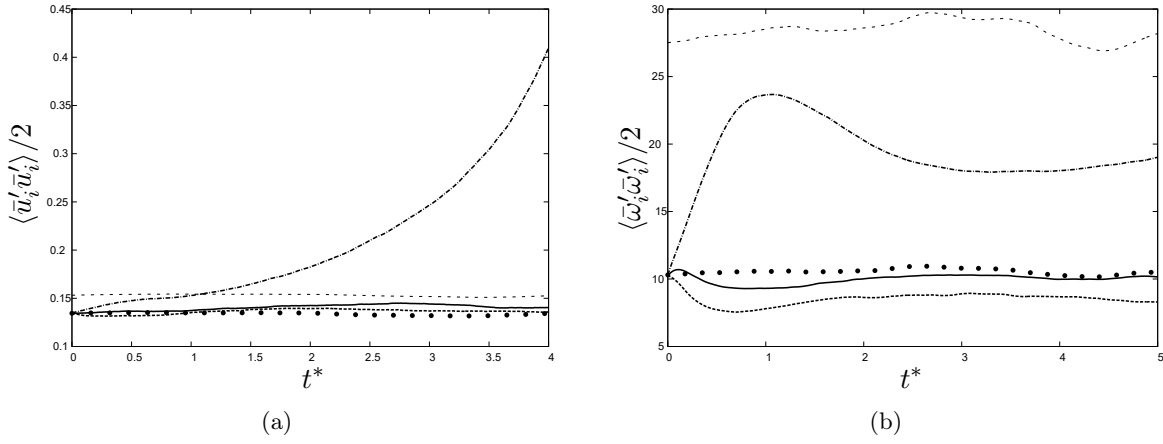


FIGURE 3.21 – Evolution de l'énergie cinétique résolue des champs de vitesse de la THIF avec les modèles sous-maille *DSM* (-----), *DRGM* (—), *GM* (-·-·-) en comparaison avec la *SND* (- - -) et la *SND* filtrée (• •) pour la résolution de 32^3 (a). Evolution de l'entrophie résolue des champs de vorticit  de la THIF pour les m mes mod les sous-maille dans le cas de la r solution de 64^3 (b).

Pour les SGE de 64^3 points de grille, l'entrophie r solv e montre la sur-pr diction de l' nergie des plus petites  chelles r solv es, figure 3.21(b), par *GM*. Outre l'instabilit  de *GM*, nous remarquons une fois de plus le caract re sous-pr dictif de *DSM* et le bon comportement de *DRGM*.

Les spectres moyens d' nergie cin tique r solv e au cours de plusieurs p riodes de temps de retournement tourbillonnaire sont repr sent s sur les figures 3.22. Ces spectres confirment la bonne pr diction des niveaux d' nergie cin tique pour tous les nombres d'ondes du champ de vitesse r solv e avec *DRGM*.

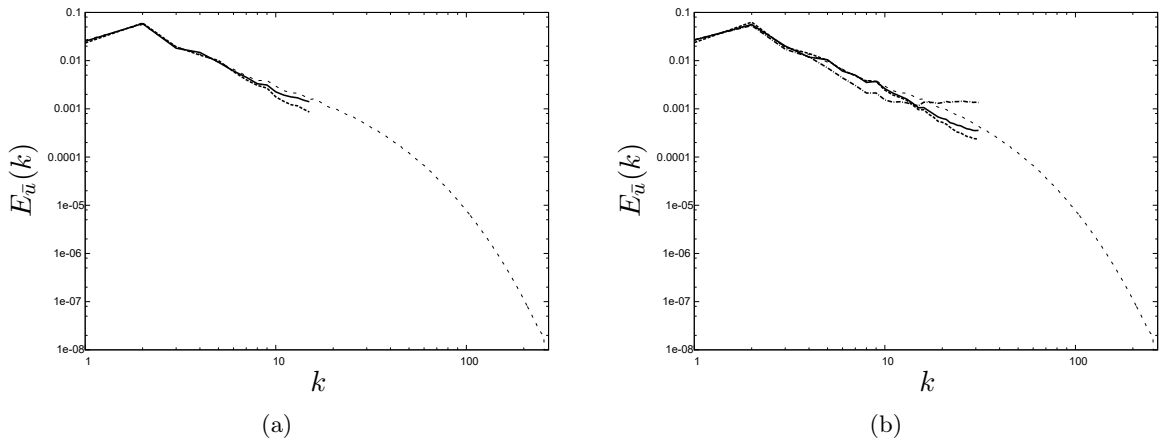


FIGURE 3.22 – Spectres de l' nergie cin tique r solv e moyenn s sur 7 unit s de temps de retournement tourbillonnaire pour les mod les sous-maille *DSM* (-----), *DRGM* (—), *GM* (-·-·-) en comparaison avec la *SND* (- - -) pour les r solutions de 32^3 (a) et 64^3 (b). Le spectre de l' nergie cin tique du champ de vitesse du *GM* n'est pas repr sent  pour la SGE de 32^3   cause de son instabilit .

Canal plan

Dans ces tests *a posteriori*, seuls les mod les *DSM* et *DRGM* sont test s car l'instabilit  des simulations avec le mod le *GM* a d j   t  mise en  vidence avec le code spectral. Ces simulations sont r alis es avec le code de calcul YALES2 [63]. Ce code r sout les  quations de Navier-Stokes bas Mach pour les  coulements avec r action chimique et sur des maillages non-structur s en utilisant des m thodes de projection pour les  coulements   densit  variable ou constante. Il s'appuie sur des m thodes num riques volumes finis centr s d'ordre 4 et sur des solveurs lin aires tr s efficaces ce qui permet de r aliser des simulations et des post-traitements d' coulements isothermes, de r action chimique ou d' coulements multiphasiques massivement parall les [69, 43, 62]. Deux configurations

de SGE sont effectuées en configurations de canal plan. Les dimensions sont $(x, y, z) = (2\pi\delta, 2\delta, \pi\delta)$ où x est la direction de l'écoulement et y la direction normale aux parois. Les résolutions choisies sont $(N_x, N_y, N_z) = (48, 64, 48)$ pour $Re_\tau = 180$ et $(N_x, N_y, N_z) = (48, 64, 72)$ pour $Re_\tau = 300$ avec $Re_\tau = \delta u_\tau / \nu$. Ces grandeurs théoriques de nombre de Reynolds à la paroi sont obtenues en forçant la vitesse débitante du canal $u_m = 1$ et en calculant la viscosité grâce à la corrélation de Dean [20] et au Re_τ désiré. En combinant ces relations, il vient :

$$\nu = \left(\frac{0.073^8}{2^{10} Re_\tau^{16}} \right)^{1/7} \delta u_m. \quad (3.47)$$

Re_τ	Re_τ^{eff} du <i>DRGM</i>	Re_τ^{eff} du <i>DSM</i>
300	278	271
180	166	162

TABLE 3.1 – Re_τ^{eff} en fonction des Re_τ théorique et des modèles sous-maille utilisés.

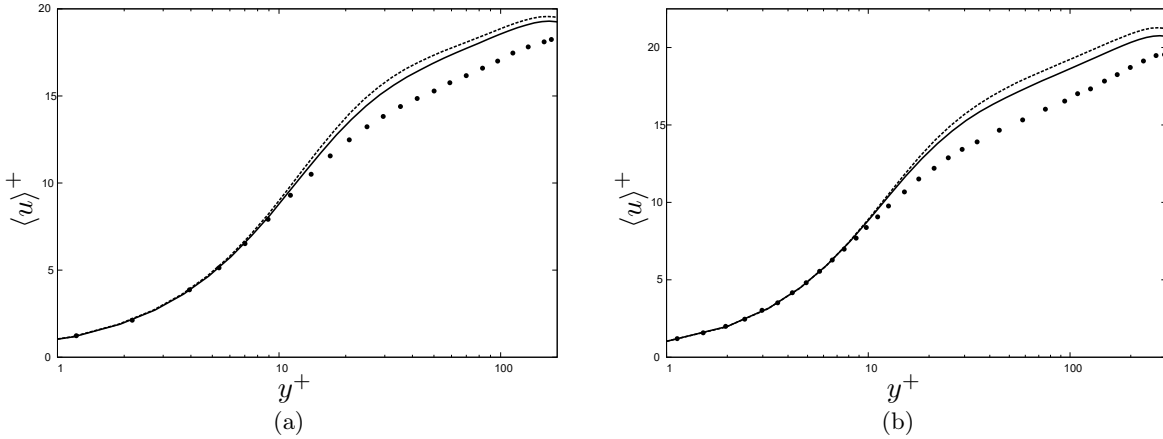


FIGURE 3.23 – Profils de vitesse débitante moyenne en fonction de la distance à la paroi en unité de paroi pour les modèles *DRGM* (—), *DSM* (-----) et la *SND* (• •) pour les Re_τ de 180 (a) et 300 (b) théoriques.

Ces SGE sont comparées aux statistiques des *SND* de Morinishi *et al.* [60] obtenus à $Re_\tau = 300$ et de You & Moin [98] pour $Re_\tau = 180$. Ces *SND* sont respectivement de résolution $(N_x, N_y, N_z) = (128, 128, 128)$ et $(N_x, N_y, N_z) = (128, 161, 128)$. Les résultats des figures 3.23 et 3.24 sont présentés en unité de paroi. A cet effet, leur normalisation est effectuée avec

$$u_\tau \equiv \sqrt{\nu \left. \frac{\partial \langle u \rangle}{\partial y} \right|_{y=0}} \quad \text{et} \quad l_\tau \equiv \frac{\nu}{u_\tau} \quad (3.48)$$

respectivement la vitesse pariétale et la longueur pariétale. Dans la suite, les exposants \cdot^+ indiquent que les grandeurs sont en unité de paroi. Malgré la similarité des paramètres entre les SGE, l'influence des modèles sous-maille modifie le niveau de turbulence réel pour un même forçage. Chaque SGE atteint un Re_τ^{eff} qui lui est propre, et ses valeurs sont récapitulées dans le tableau, 3.1. La normalisation des variables est donc réalisée en unité de paroi avec les grandeurs effectives ce qui permet de comparer les résultats entre les deux modèles. Les profils d'évolution des quantités en fonction de la distance à la paroi sont obtenus après l'établissement d'un état statistiquement stationnaire.

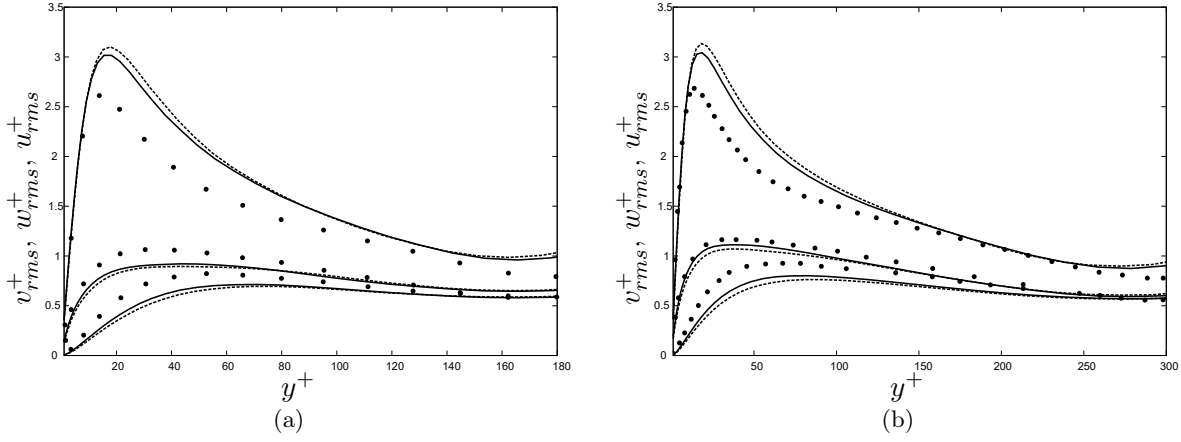


FIGURE 3.24 – Profils des fluctuations des composantes de la vitesse en fonction de la distance à la paroi pour les modèles *DRGM* (—), *DSM* (-----) et la SND (• •) pour les Re_τ de 180 (a) et 300 (b) théoriques.

La figure 3.23 présente les profils des vitesses normalisées dans la direction du gradient de l'écoulement, moyennées en temps et en espace dans les plans (x, z) , parallèles à la paroi. Les résultats sont les mêmes dans les deux configurations. On constate, dans la sous-couche visqueuse, que les vitesses normalisées prédites par les modèles *DRGM* et *DSM* sont en bon accord avec leurs SND respectives. Les profils des vitesses normalisées moyennes des deux modèles s'écartent de leur SND au début de la zone logarithmique où la production d'énergie cinétique turbulente est maximale. Dans la zone logarithmique, *DRGM* a les prédictions les plus proches des SND.

Ces conclusions sont également applicables aux résultats sur les fluctuations moyennes des composantes de la vitesse normalisée des figures 3.24. Pour les composantes v et w , *DRGM* a une meilleure prédiction que *DSM* car les profils de fluctuation des vitesses sont plus proches des SND. En revanche, les deux modèles sur-prédisent les fluctuations sur la composante u , au début de la zone logarithmique. Le *DRGM* minimise toutefois cette sur-prédiction.

Conclusions

En définitive, le modèle $DRGM^v$ s'avère être une régularisation performante du GM^v . Il assure des SGE stables en prédisant des statistiques du champ de vitesse en accord avec les statistiques des SND filtrés dans les cas de THI et des SND dans le cas du canal plan.

Ces deux nouveaux modèles ($DRGM^v$ et $DRGM^s$) constituent une famille de modèles dite du "gradient régularisé". Elle peut être comparée à d'autres familles comme celle des modèles de type "Smagorinsky dynamique" ou encore celle des modèles de type "gradient".

Dans la partie qui suit, nous allons effectuer des SGE couplées de la vitesse et du scalaire pour étudier l'influence de la combinaison des modélisations des vecteurs et tenseurs sous-maille, sur l'évolution des grandeurs statistiques du scalaire passif résolu.

3.3 Couplage des modèles sous-maille pour la vitesse et le scalaire

Dans la partie 3.1, qui a présenté les tests *a posteriori* de la régularisation du modèle du gradient pour le scalaire, l'équation d'évolution du scalaire était résolue avec \bar{u}_i^{SND} afin de s'affranchir des erreurs de modélisation sur la vitesse. Dans ces tests *a posteriori*, le champ de vitesse va également être résolu par SGE, pour la même résolution que le scalaire afin d'évaluer chaque famille de modèle. Ainsi, l'équation résolue pour le scalaire est

$$\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} + \bar{u}_i^{SGE} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i} = \frac{\nu}{Sc} \frac{\partial^2 \bar{\theta}}{\partial x_i^2} - \frac{\partial \tau_i(\bar{\Delta}, \bar{\theta}, \bar{u}_i^{SGE})}{\partial x_i}, \quad (3.49)$$

où le modèle sous-maille utilisé pour la vitesse sera de la même famille que celui du scalaire. Ces tests vont permettre de conclure quant à l'efficacité d'une même famille de modèles sous-maille en comparant les résultats des statistiques de scalaire passif issu des SGE couplées avec les statistiques du scalaire de la SND filtrée. Pour la première configuration de tests *a posteriori*, les champs de scalaire sont initialisés par la méthode d'Eswaran & Pope [28] et vont décroître librement dans un champ de vitesse en THIF similaire aux tests *a posteriori* précédents. La seconde configuration de test *a posteriori* est un scalaire passif placé dans des écoulements de canal plan pour permettre la comparaison des profils des statistiques de scalaire en fonction de la distance à la paroi. Dans ces simulations, le scalaire est normalisé en unité de paroi par

$$\theta_\tau = \frac{\nu}{Sc u_\tau} \left. \frac{\partial \langle \theta \rangle}{\partial y} \right|_{y=0}. \quad (3.50)$$

3.3.1 Décroissance en turbulence homogène isotrope forcée

Deux SGE de résolutions 32^3 et 64^3 points pour les composantes du champ de vitesse et de scalaire à $Sc = 0.7$ sont simulées. Nous comparons l'évolution des variances du scalaire résolu de SGE avec la SND filtrée sur les figures 3.25. Les simulations en 32^3 sont les plus discriminantes pour les familles de modèles. La SGE des modèles de la famille de type gradient montre que la prédiction de la variance du scalaire diverge à cause de la création de fluctuations non physiques dans les petites échelles résolues. Ces fluctuations sont visibles sur les spectres de la figure 3.26.

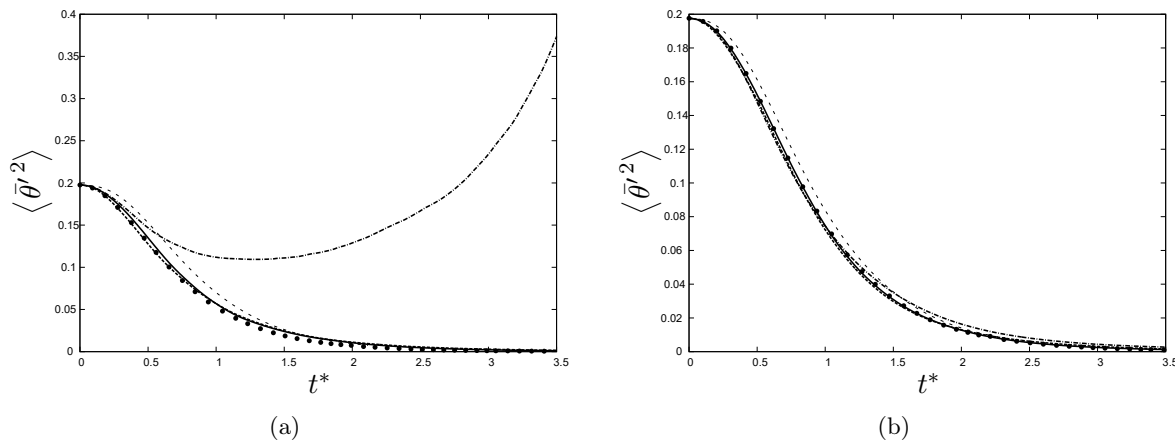


FIGURE 3.25 – Evolution de la variance des scalaires résolus avec les couples de modèles Smagorinsky dynamique (-----), gradient régularisé (—), gradient (- - - -) en comparaison avec la SND (- - -) et la SND filtrée (• •) pour les résolutions 32^3 (a) et 64^3 (b).

Dans ce cas de couplage des SGE de vitesse et de scalaire, la sur-prédiction des petites échelles d'énergie cinétique résolue constatée sur les figures 3.21(a) et 3.22(a), amplifie le phénomène d'apparition de petites échelles. Cette amplification des petites échelles du scalaire résolu avec les modèles de la famille de type gradient, n'est pas visible sur la figure 3.25(b) de la simulation en 64^3 avant $t^* = 1.2$, par contre, le spectre à $t^* = 0.55$ de la figure 3.26(b) et l'évolution de l'enstrophie sur la figure 3.27(b) montrent clairement cette sur-prédiction des petites échelles résolues. On constate que la sous-prédiction des échelles intermédiaires participe à l'équilibre artificiel d'évolution de la variance résolue. La sous-évaluation de la variance du scalaire résolu avec les modèles de type Smagorinsky n'apparaît pas de façon évidente si on s'intéresse seulement à l'évolution de la variance sur les figures 3.25. Par contre, sur l'évolution de l'enstrophie du scalaire résolu, figures 3.27, et sur les petites échelles résolues des spectres de la variance, (figures 3.26), les sous-prédictions apparaissent et traduisent les propriétés sur-dissipatives des modèles de type Smagorinsky. Enfin les SGE effectuées avec la famille des modèles du gradient régularisé offrent les meilleures prédictions d'évolution des statistiques de scalaire.

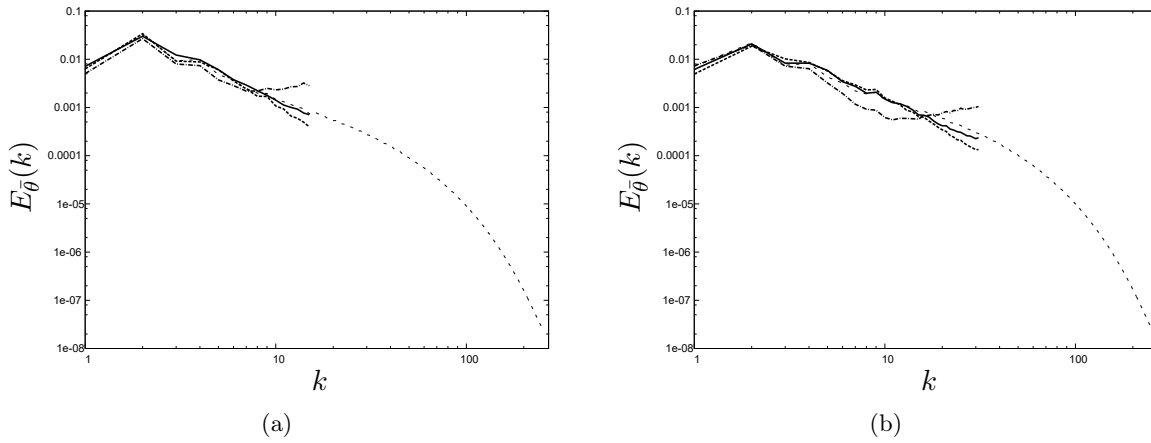


FIGURE 3.26 – Spectres de la variance des scalaires résolus avec les couples de modèles Smagorinsky dynamique (-----), gradient régularisé (—), gradient (-----) en comparaison avec la SND filtrée ($\bullet \bullet$) pour les résolutions de 32^3 (a) et 64^3 (b) à l'instant $t^* = 0.55$.

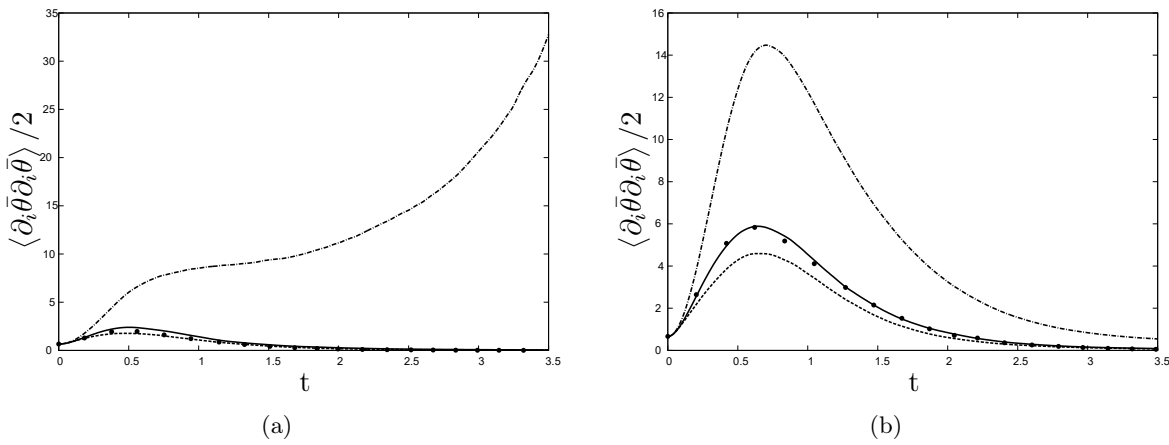


FIGURE 3.27 – Evolution de l'enstrophie des scalaires résolus avec les couples de modèles Smagorinsky dynamique (-----), gradient régularisé (—), gradient (-----) en comparaison avec la SND (---) et la SND filtrée ($\bullet \bullet$) pour les résolutions 32^3 (a) et 64^3 (b).

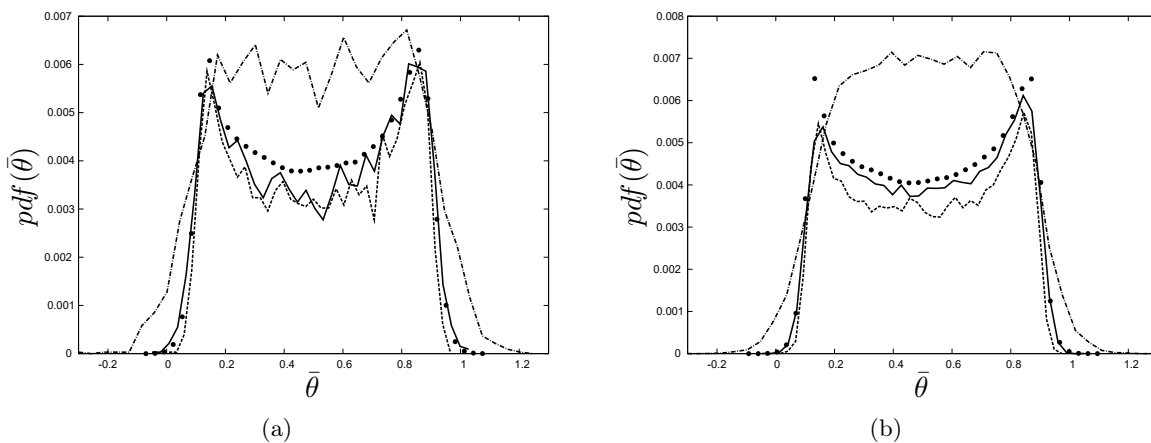


FIGURE 3.28 – Fonctions de densité de probabilité des valeurs de scalaire résolu par les couples de modèles Smagorinsky dynamique (-----), gradient régularisé (—), gradient (-----) en comparaison avec la SND filtrée ($\bullet \bullet$) pour les résolutions de 32^3 (a) et 64^3 (b) à l'instant $t^* = 0.55$.

Les conclusions sont similaires sur les fonctions de densité de probabilité des figures 3.28. Les scalaires

résolus par la famille des modèles du gradient ont des valeurs extrêmes non physiques, ainsi que des probabilités d'existence sur-prédites, aussi bien au voisinage des valeurs extrêmes qu'aux environs de la valeur moyenne. Les scalaires des modèles de type Smagorinsky présentent une légère sous-prédiction de probabilité d'existence à toutes les valeurs, alors que les scalaires obtenus avec la famille des gradients régularisés sont les plus fidèles à la SND filtrée.

3.3.2 Canal plan

Dans les configurations de canal plan de $Re_\tau = 180$ et $Re_\tau = 300$, des SGE ont été réalisées sur des scalaires passifs avec des nombres de Schmidt moléculaires de respectivement 25 et 0.72. Les SND sont comparables à celles de You & Moin [98] et nous comparons les statistiques de ces scalaires aux statistiques des scalaires obtenus par SGE. Les quantités sont moyennées en temps et en espace dans les plans parallèles aux parois.

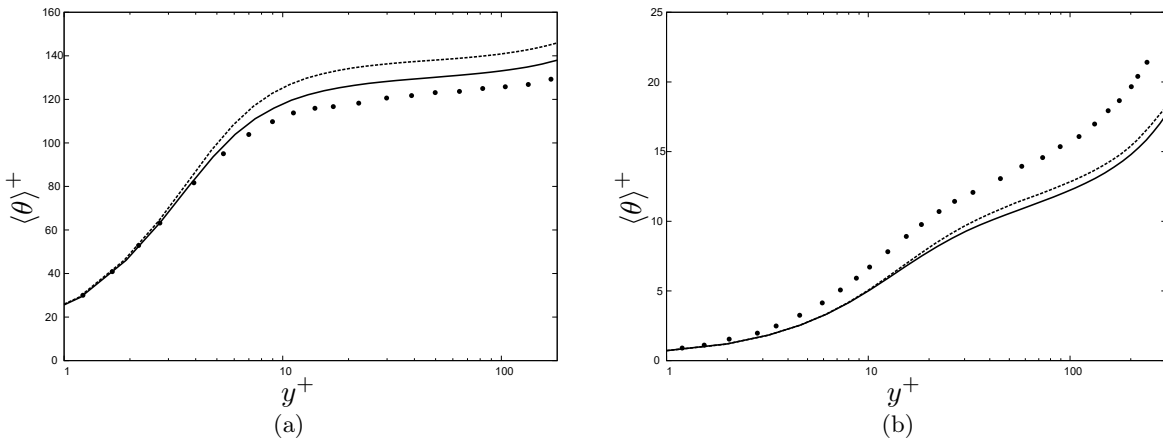


FIGURE 3.29 – Profils de scalaire moyen en fonction de la distance à la paroi en unité de paroi pour les SGE des familles de modèles Smagorinsky dynamique (-----) et gradient régularisé (—) en comparaison avec la SND ($\bullet \bullet$) et de caractéristique $Re_\tau = 180$ et $Sc=25$ (a) et $Re_\tau = 300$ et $Sc=0.72$ (b)

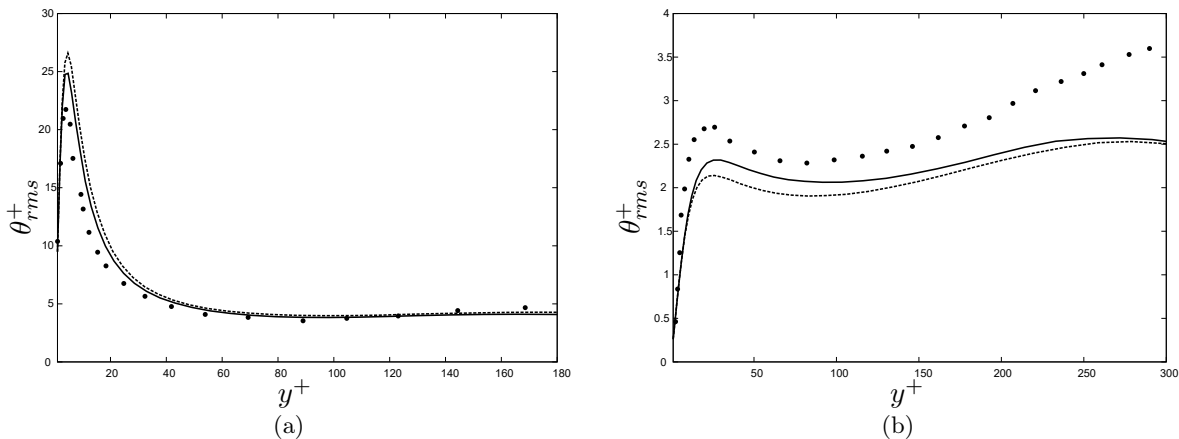


FIGURE 3.30 – Profils des fluctuations moyennes en fonction de la distance à la paroi en unité de paroi pour les SGE des familles de modèles Smagorinsky dynamique (-----) et gradient régularisé (—) en comparaison avec la SND ($\bullet \bullet$) et de caractéristique $Re_\tau = 180$ et $Sc=25$ (a) et $Re_\tau = 300$ et $Sc=0.72$ (b)

Pour le scalaire à $Sc = 25$ (figure 3.29(a)), on constate que les deux scalaires normalisés sont en accord avec celui de la SND dans la sous-couche visqueuse. En se rapprochant du centre du canal, on constate que les deux modèles sur-prédisent les valeurs de scalaire normalisé en moyenne. Cependant, le scalaire

issu de la famille des modèles du gradient régularisé montre le profil le plus proche de la SND. Les résultats sur les scalaires de $Sc = 1$ de la figure 3.29(b) montrent des valeurs moyennes inférieures à la SND. Ces résultats mettent en évidence une moins bonne prédiction des modèles de la famille du gradient régularisé par rapport aux prédictions de la famille des modèles de Smagorinsky dynamique dans la zone logarithmique de la couche limite de la vitesse.

Les fluctuations du scalaire pour la SND de nombre de Schmidt moléculaire $Sc = 25$ atteignent un maximum dans la sous-couche visqueuse, au maximum de production d'énergie cinétique turbulente. Le scalaire de $Sc = 0.72$ a aussi un maximum mais avec une plus faible amplitude. Dans cette zone, les fortes capacités de mélange du champ de vitesse agissent sur le scalaire pour créer de petites échelles ; puisque le scalaire à $Sc = 25$ se diffuse moins que le scalaire à $Sc = 0.72$, alors il s'homogénéise moins et il subsiste des petites échelles de scalaire responsables du maximum de fluctuation. Les fluctuations des scalaires des modèles du type gradient régularisé sont en meilleur accord avec la SND que celles des scalaires des modèles DSM. La sur-prédiction des fluctuations pour le cas $Sc = 25$ est atténuée par rapport aux modèles DSM.

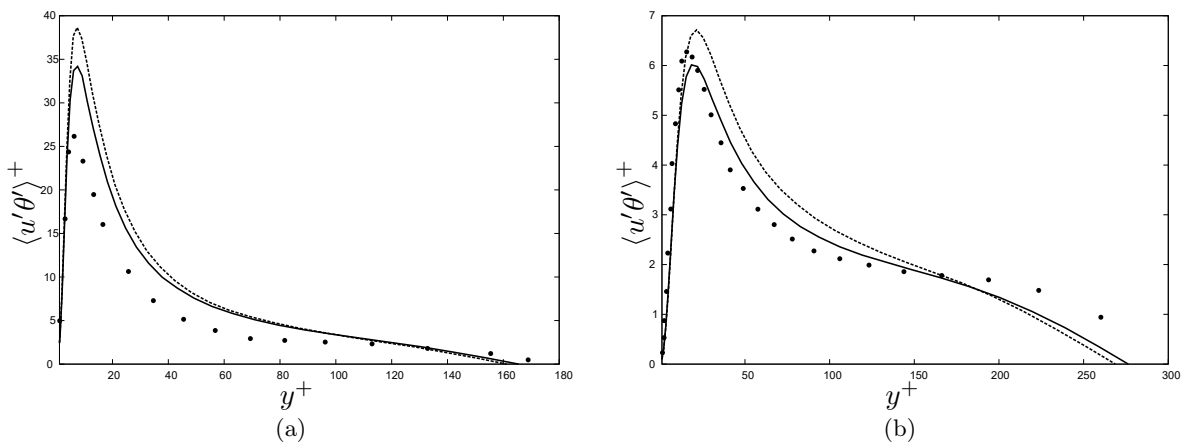


FIGURE 3.31 – Profils de $\langle u'\theta' \rangle$ en fonction de la distance à la paroi en unité de paroi pour les SGE des familles de modèles Smagorinsky dynamique (-----) et gradient régularisé (—) en comparaison avec la SND ($\bullet \bullet$) et de caractéristique $Re_\tau = 180$ et $Sc=25$ (a) et $Re_\tau = 300$ et $Sc=0.72$ (b)

Enfin les profils de $\langle u'\theta' \rangle$ sont présentés sur les figures 3.31. Pour les cas à $Sc = 25$, des constatations similaires à celles faites pour les fluctuations du scalaire peuvent être émises, à savoir : les modèles sur-estiment cette quantité au voisinage du pic de production d'énergie cinétique turbulente résolue avec une réduction de cette sur-prédiction pour les statistiques des scalaires résolus par les modèles de type gradient régularisé. Pour les scalaires de $Sc = 0.72$ (figures 3.31) les SGE des modèles "gradients régularisé" sont les plus proches de la SND malgré un décalage de la localisation du maximum.

Dans la configuration de décroissance de scalaire, les simulations sont effectuées avec le code pseudo-spectral. Par conséquent, la prédiction du scalaire est influencée seulement par les erreurs de modélisation du tenseur sous-maille de la vitesse τ_{ij} et du vecteur sous-maille du scalaire τ_i . Dans la configuration du canal plan, les SGE sont effectuées avec un code où la discrétisation spatiale est de type volumes finis. Donc des erreurs numériques de discrétisation spatiale viennent s'ajouter aux erreurs de modélisation.

Dans les deux cas, le scalaire résolu avec la famille des modèles du gradient régularisé présente les statistiques se rapprochant le plus de la SND filtrée pour le cas de la décroissance et de la SND pour le canal plan. Ce constat est le même pour les différents niveaux de résolution des SGE et pour tous les nombres de Schmidt moléculaires testés.

3.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons mis en place une régularisation des modèles du gradient pour le scalaire passif et la vitesse grâce à une procédure assez systématique, à savoir

1. Décomposition des gradients de la vitesse en $\bar{\mathbf{S}}$ et $\bar{\mathbf{\Omega}}$ puis en $\bar{\mathbf{S}}^\oplus$ et $\bar{\mathbf{S}}^\ominus$.
2. Sélection fonctionnelle des termes par identification de ceux responsables de backscatter.
3. Sélection structurelle des termes à partir du concept d'estimateur optimal, par le calcul des erreurs irréductibles.
4. Procédure de calcul de coefficient dynamique pour :
 - exploiter le potentiel structurel des jeux de variables sélectionnés.
 - ajuster le niveau de dissipation sous-maille du modèle à la simulation.
5. Validation structurelle grâce au concept d'estimateur optimal avec comparaison des erreurs quadratiques et irréductibles.
6. Validations fonctionnelles via le calcul des transferts globaux d'énergie de la partie résolue vers la partie modélisée.
7. Validation *a posteriori*

Cette procédure s'effectue en grande partie *a priori* des étapes 1 à 6. Dans les cas des modèles *DRGM*, la validation *a posteriori* confirme les performances *a priori*. Ce processus de conception de modèle illustre l'intérêt du concept d'estimateur optimal, outil polyvalent et performant.

Le modèle *DRGM^s* a montré d'excellentes performances et a permis de développer un modèle algébrique très efficace pour la prédiction de scalaire par rapport au *DSM* et au *GM^s*. L'intérêt est moins immédiat pour la régularisation du *GM^v* qui a fait l'objet de deux formes algébriques *DRGM* et *MRGM*, avant d'aboutir à un compromis.

Comme indiqué en introduction de ce chapitre, les modèles algébriques *DRGM^s*, et *DRGM^v* sont les premiers à allier de bonnes performances structurelles et fonctionnelles. Auparavant, les seuls modèles qui alliaient de bonnes performances fonctionnelles et structurelles étaient obtenus en combinant artificiellement différents modèles comme par exemples, le modèle mixte de Zang *et al.* [101] et le modèle de Clark *et al.* [13].

Après avoir utilisé l'estimateur optimal comme un outil de diagnostic, et d'évaluation de performances dans un processus de régularisation de modèles, nous nous proposons dans le chapitre qui suit d'utiliser directement l'estimateur optimal comme un modèle sous maille.

Chapitre 4

Utilisation de l'estimateur optimal comme modèle sous-maille

Sommaire

4.1	Lien entre SGE optimale et estimateur optimal	64
4.2	Modèle sous-maille optimal : variables de modèles classiques	66
4.2.1	Modèles classiques et EO associés	66
4.2.2	Éléments de définitions des EO	67
4.2.3	Tests <i>a priori</i>	68
4.2.4	Tests <i>a posteriori</i>	70
4.2.5	Conclusions	71
4.3	Choix d'un jeu de variables de conditionnement irréductible et optimal .	71
4.3.1	Décomposition complète et irréductible de τ_i	72
4.3.2	Résultats des tests <i>a priori</i>	73
4.4	Modèle sous-maille constitué de réseaux de neurones	75
4.4.1	Réseau perceptron multi-couches et topologie	76
4.4.2	Apprentissage de l'estimateur optimal	78
	Normalisation des stimuli	78
	Le modèle <i>ANNM</i>	79
4.5	Performance du modèle <i>ANNM</i>	80
4.5.1	Tests <i>a priori</i> sur la base de construction du <i>ANNM</i>	81
4.5.2	Tests <i>a posteriori</i>	84
4.5.3	Tests <i>a posteriori</i> du modèle <i>ANNM</i> sur d'autres écoulements	86
4.6	Conclusions	88

L'estimateur optimal a été utilisé jusqu'à présent dans ce travail comme un pur outil de diagnostic de modèles sous-maille, très utile pour identifier les marges d'amélioration de modèles disponibles, comme nous l'avons illustré au chapitre précédent. Dans ce chapitre, nous allons utiliser des estimateurs optimaux de la divergence du flux scalaire sous-maille exact ou des modèles se substituant à ceux-ci, directement comme modèles sous-maille. Cette idée est notamment évoquée dans les conclusions et perspectives du manuscrit de thèse de A. Moreau [58] qui est à l'origine de l'utilisation de la technique d'estimation optimale dans la SGE.

Il nous semble intéressant de montrer, en ouverture de ce chapitre, que le concept d'estimateur optimal peut être directement relié à la théorie de la simulation des grandes échelles optimale (SGEO) de Langford & Moser [45]. Utiliser l'estimateur optimal comme modèle sous-maille est donc une stratégie possible de réalisation pratique du concept de SGEO.

Dans un premier temps, nous allons calculer cet estimateur optimal en fonction de plusieurs jeux de variables de conditionnement, issus de modèles sous-maille existants. Nous utiliserons directement ces estimateurs optimaux en modèle sous-maille et nous montrerons par des tests *a priori* et *a posteriori* que l'estimateur optimal offre bien de meilleures performances que le modèle sous-maille dont il

est issu, *i.e.* dont il emprunte les variables pour construire le jeu de variables de conditionnement. Il est ainsi possible d'envisager de construire des modèles sous-maille ayant une erreur quadratique égale à l'erreur irréductible associée au jeu de variables de conditionnement donc possédant une erreur de forme fonctionnelle nulle.

Construire des modèles plus performants revient à former un jeu de variables susceptible de diminuer encore la valeur de l'erreur irréductible. Pour franchir cette étape, nous nous inspirons des travaux de Wang *et al.* [96] en utilisant la décomposition vectorielle et tensorielle des fonctions à valeurs vectorielles de Noll [67] pour construire une décomposition complète et irréductible [102] du vecteur sous-maille du scalaire passif. Cette décomposition va servir de base génératrice pour plusieurs jeux possibles de variables de modèles sous-maille. Nous utiliserons alors la théorie de l'estimateur optimal pour déterminer le jeu de variables minimisant l'erreur irréductible.

L'utilisation directe de l'estimateur optimal comme modèle sous-maille est techniquement délicate compte tenu des difficultés de mise en oeuvre de la méthode histogramme pour un grand nombre de variables (voir section 2.2.2 du chapitre 2). Nous proposons donc de construire un modèle sous-maille sous forme d'un modèle substitut reproduisant la réponse de l'estimateur optimal pour un coût de mise en oeuvre réduit.

Nous choisirons une méthode d'apprentissage supervisé, de type réseau de neurones, pour construire ce nouveau modèle sous-maille se substituant à l'estimateur optimal. Cette construction correspond précisément à la phase d'apprentissage qui consiste à ajuster les paramètres d'une fonction non linéaire à des couples numériques d'entrées/sorties. Dans notre cas, les entrées sont les valeurs discrètes des variables retenues pour construire le modèle et les sorties sont les valeurs discrètes de la divergence du flux scalaire sous-maille exact.

Nous effectuerons des tests *a priori* du modèle ainsi construit pour valider sa phase d'apprentissage puis nous le testerons *a posteriori* dans différentes situations d'écoulement pour évaluer cette nouvelle stratégie de génération de modèles sous-maille. Nous montrerons les aptitudes mais aussi les difficultés d'adaptation d'un tel modèle sous-maille à des écoulements ayant des physiques différentes de celle associée à sa base de construction.

4.1 Lien entre la SGE optimale et l'utilisation de l'estimateur optimal comme modèle sous-maille

Précisons tout d'abord comment l'estimateur optimal peut être relié à la théorie de la SGE optimale, concept proposé par Langford & Moser [45]. Si on considère un écoulement complètement caractérisé par des champs b , à tout instant et en tout point de l'espace, Langford & Moser [45] énoncent qu'un modèle sous-maille optimal doit minimiser la moyenne de l'erreur quadratique E_q construite à partir des évolutions temporelles des champs de cet écoulement avancés par la SGE optimale (SGEO) notés a et des évolutions temporelles des champs filtrés déduits de la SND notés \bar{b} . Ceci se traduit par une relation d'implication :

$$\text{SGEO} \implies \min \left(E_q = \left\langle \left(\frac{\partial a}{\partial t} - \frac{\partial \bar{b}}{\partial t} \right)^2 \right\rangle \right). \quad (4.1)$$

De plus, par définition, la SGE ne résout que les grandes échelles donc l'opération de filtrage n'est pas inversible. La perte d'information lors de cette opération entraîne que l'erreur E_q ne sera jamais nulle. L'évolution temporelle des champs a minimisant E_q est une évolution stochastique des champs exacts b filtrés, définie comme sa moyenne conditionnée par les champs a :

$$\frac{\partial a}{\partial t} = \left\langle \frac{\partial b}{\partial t} \middle| \bar{b} = a \right\rangle \implies \min (E_q), \quad (4.2)$$

avec $\langle \cdot | \cdot \rangle$ la moyenne conditionnelle sur le domaine de simulation. La décomposition de l'équation d'évolution des champs a avec le formalisme SGE fait apparaître le terme sous-maille de la SGEO Π_a

et la décomposition de celle des champs \bar{b} mène au terme sous-maille exact Π_b . Appliquer la relation (4.2) aux équations d'évolutions de la SGE0 et de la SND fournit la définition du terme sous-maille idéal :

$$\Pi_a = \langle \Pi_b | a \rangle \implies \min \left(\langle (\Pi_b - \Pi_a)^2 \rangle \right) \implies \frac{\partial a}{\partial t} = \left\langle \frac{\partial \bar{b}}{\partial t} \middle| \bar{b} = a \right\rangle. \quad (4.3)$$

Par transitivité, les implications (4.2) et (4.3) montrent donc qu'en estimant le terme sous-maille Π_a comme étant égal à $\langle \Pi_b | a \rangle$, on assure une évolution optimale des champs a au sens de la minimisation de E_q , pour un filtrage donné. Le membre de gauche de la relation (4.3) indique à lui seul la difficulté de réalisation de cette SGE0, dans la mesure où le calcul de cette moyenne conditionnelle Π_a prend en compte toutes les valeurs spatiales des champs exacts filtrés.

La transposition de la théorie de la SGE0 à l'équation du scalaire passif filtré z revient à estimer le terme sous-maille optimal (SMO) comme :

$$\frac{\partial \tau_i^{SMO}}{\partial x_i} = \left\langle \frac{\partial \tau_i^{SND}}{\partial x_i} \middle| \{ \bar{Z} = z, \bar{u}_i \} \right\rangle, \quad (4.4)$$

avec $\tau_i^{SND} = \overline{u_i Z} - \bar{u}_i \bar{Z}$, u_i les composantes exactes du champ de vitesse turbulent, Z le scalaire passif exact et z le scalaire passif dont l'évolution est calculée par la SGE0. Comme évoqué précédemment, l'ensemble des variables de conditionnement $\{ \bar{Z} = z, \bar{u}_i \}$ est défini sur tout le domaine de calcul, *i.e.* l'estimation de $\partial_i \tau_i^{SMO}$ en un point de l'espace nécessite de disposer des champs spatiaux complets de \bar{Z} et \bar{u}_i . Le nombre de variables de conditionnement en chaque point de l'espace est donc de l'ordre de grandeur du nombre de degrés de liberté de l'écoulement multiplié par le nombre de variables. La SGE0 apparaît donc comme un concept qui est difficilement utilisable en pratique. Des modèles sous-maille pour l'équation de quantité de mouvement ont été néanmoins proposés sur la base de ce concept [47, 61, 100] au prix de certaines simplifications.

Précisons maintenant en quoi notre démarche d'estimation optimale se différencie du concept de SGE0 mais aussi comment elle peut lui être reliée. Nous proposons tout d'abord de remplacer l'ensemble des variables de conditionnement de la relation (4.4), défini sur l'intégralité du domaine de calcul, par des ensembles définis seulement au point de grille où est estimé le terme sous-maille optimal. Langford & Moser ont montré que les performances obtenues avec une telle formulation locale sont assez satisfaisantes [47]. De plus, nous proposons d'utiliser des ensembles de variables de conditionnement faisant intervenir des grandeurs physiques utilisées dans les modèles sous-maille existants. Nous espérons ainsi remplacer le nombre élevé de variables élémentaires définies sur l'ensemble du domaine de calcul qui caractérise la SGE0 formulée à l'origine, par un nombre de variables limité et synthétisant localement un maximum d'information.

En adoptant ces choix, le modèle sous-maille d'une SGE optimale locale au sens de Langford & Moser [45], *i.e.* uniquement basé sur un ensemble de variables physiques locales $\{\phi\}$ défini au même point d'espace, est équivalent à l'estimateur optimal proposé par Moreau [59], ce que l'on traduit en écrivant :

$$\boxed{\frac{\partial \tau_i^{SGEOLocale}}{\partial x_i} = \frac{\partial \tau_i^{EO}}{\partial x_i} = \left\langle \frac{\partial \tau_i^{SND}}{\partial x_i} \middle| \{\phi\} \right\rangle}. \quad (4.5)$$

Précisons que les variables issues de modèles existants font intervenir des opérateurs de dérivation spatiale. La stricte localité de l'information n'est donc pas conservée et dépend en fait de l'ordre de la méthode numérique employée pour approcher ces dérivées. Dans notre cas, les méthodes spectrales utilisées sont d'ordre infini et tous les points du domaine interviennent dans le calcul de la dérivée d'une grandeur en un point.

Le concept de SGE0 de Langford & Moser et notre approche d'estimation optimale du terme sous-maille font tous les deux appel au calcul de la moyenne conditionnelle du même terme $\partial_i \tau_i^{SND}$. Dans le

cas de la SGEO, ce calcul doit être réalisé avec l'ensemble des variables de conditionnement $\{\bar{Z} = z, \bar{u}_i\}$ défini sur tout le domaine de calcul, ce qui le rend inabordable en pratique alors que dans le cas de l'estimateur optimal, l'ensemble de variables de conditionnement $\{\phi\}$ est défini localement, ce qui rend possible la mise en oeuvre de cette démarche.

Nous nous proposons maintenant d'appliquer ce concept d'EO comme modèle sous-maille "optimal" dans le cas où les variables de conditionnement $\{\phi\}$ de la divergence du flux scalaire sous-maille exact sont issues de deux modèles classiques pour le calcul du scalaire passif. Nous démontrons dans la section qui suit l'intérêt des modèles ainsi construits via des tests *a priori* et *a posteriori*.

4.2 Modèle sous-maille optimal : conditionnement par des variables issues de modèles classiques

Un modèle sous-maille fonctionnel classique basé sur le modèle de Smagorinsky [86] et un modèle structural de type modèle mixte sont choisis pour illustrer le concept d'estimateur optimal utilisé directement en tant que modèle sous-maille.

4.2.1 Modèles classiques et EO associés

Notre point de départ pour construire des modèles sous-maille à partir de la théorie de l'estimateur optimal est constitué par les modèles classiques couramment utilisés en SGE pour le scalaire passif. L'un des modèles les plus répandus est basé sur une hypothèse de diffusivité sous-maille de type Smagorinsky [86]. Ce modèle fonctionnel peut se montrer trop dissipatif dans des configurations de transition vers la turbulence ou dans des cas de turbulence inhomogène [57]. Aussi, Germano *et al.* [33] ont proposé une procédure permettant d'adapter dynamiquement le coefficient du modèle de diffusivité sous-maille pour corriger ce comportement. Le modèle dynamique de diffusivité turbulente pour le scalaire passif (noté ici *DEDM* pour "Dynamic Eddy Diffusivity Model") [57], présenté au chapitre 1 est rappelé :

$$\tau_i^{DEDM} = C_d \bar{\Delta}^2 |\bar{S}| \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i}, \quad (4.6)$$

où $\bar{\Delta}$ est la taille du filtre et $|\bar{S}|$ la norme du tenseur des contraintes filtrées définie comme $(2\bar{S}_{ij}\bar{S}_{ij})^{1/2}$. Le coefficient dynamique C_d est calculé par la méthode des moindres carrés de Lilly [51],

$$C_d = \frac{\langle L_i M_i \rangle}{\langle M_i M_i \rangle} \quad \text{avec} \quad L_i = \widehat{\bar{u}_i \bar{\theta}} - \hat{\theta} \hat{u}_i \quad \text{et} \quad M_i = \hat{\Delta}^2 |\hat{S}| \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial x_i} - \bar{\Delta}^2 |\bar{S}| \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i}. \quad (4.7)$$

Dans ces expressions, la notation $\hat{\cdot}$ représente un second filtre spectral (filtre test) tel que $\hat{\Delta} = 2\bar{\Delta}$, qui illustre l'hypothèse de similarité d'échelle faite par Germano *et al.* [32] pour mettre au point cette procédure. L'autre modèle couramment utilisé est le modèle de Clark (noté désormais *CM* pour Clark Model) [13] appliqué pour le scalaire. C'est un modèle structural mixte (voir section 1.2.2 du chapitre 1) qui cherche à coupler la forte corrélation du vecteur sous-maille du modèle du gradient (noté *GM*) avec le vecteur sous-maille exact, et les performances fonctionnelles du modèle de type Smagorinsky. Dans le modèle *CM*, une procédure dynamique de Germano *et al.* [32] est appliquée au calcul du coefficient du terme de Smagorinsky en tenant compte des apports dissipatifs du modèle du gradient. Ainsi le modèle de Clark s'écrit :

$$\tau_i^{CM} = \frac{\bar{\Delta}^2}{12} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_j} + C_C \bar{\Delta}^2 |\bar{S}| \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i}, \quad (4.8)$$

où C_C un coefficient dynamique défini par :

$$C_C = \frac{\langle (L_i - H_i) M_i \rangle}{\langle M_i M_i \rangle} \quad \text{avec} \quad H_i = \frac{\hat{\Delta}^2}{12} \frac{\partial \hat{u}_i}{\partial x_j} \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial x_j} - \frac{\bar{\Delta}^2}{12} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_j} \quad (4.9)$$

L'application de la théorie de l'estimateur optimal conduit à définir l'estimateur optimal du modèle *DEDM*, noté *EO-DEDM*, par la moyenne conditionnelle suivante :

$$\frac{\partial \tau_i}{\partial x_i}{}^{EO-DEDM} = \left\langle \frac{\partial \tau_i}{\partial x_i}{}^{SND} \middle| \phi^{DEDM} \right\rangle \quad \text{avec} \quad \phi^{DEDM} = \bar{\Delta}^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(|\bar{S}| \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i} \right). \quad (4.10)$$

De la même façon, on peut définir l'estimateur optimal du modèle de Clark, noté *EO-CM*, par :

$$\frac{\partial \tau_i}{\partial x_i}{}^{EO-CM} = \left\langle \frac{\partial \tau_i}{\partial x_i}{}^{SND} \middle| \phi^{CM} \right\rangle \quad (4.11)$$

$$\text{avec} \quad \phi^{CM} = \phi^{DEDM} + \phi^{GM} = \bar{\Delta}^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(|\bar{S}| \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i} \right) + \frac{\bar{\Delta}^2}{12} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_j} \right). \quad (4.12)$$

Les ensembles de variables de conditionnement ϕ^{DEDM} et ϕ^{CM} contiennent des informations :

- sur le champ de vitesse par le biais des gradients de vitesse résolus et de la norme du tenseur des contraintes filtrées,
- sur le champ scalaire avec le gradient du scalaire résolu
- et sur la discrétisation locale via la longueur de coupure du filtrage implicite de la grille de résolution $\bar{\Delta}$.

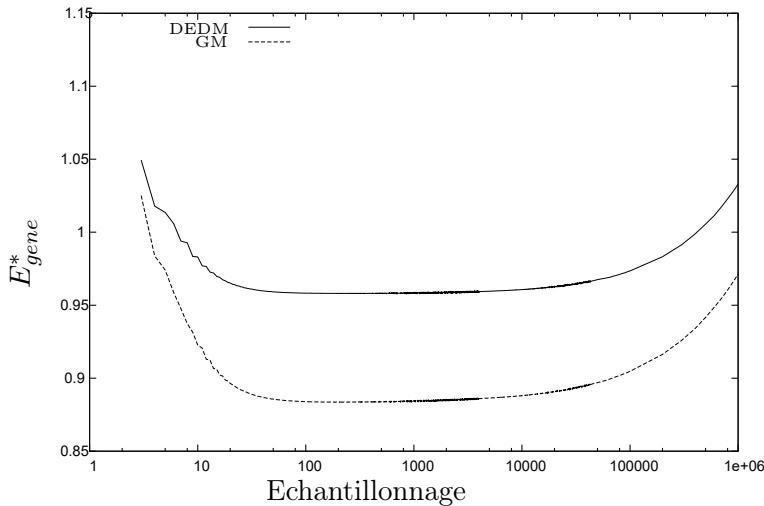


FIGURE 4.1 – Evolution de l'erreur généralisée normalisée des estimateurs optimaux *EO-GM* et *EO-DEDM* en fonction de leur échantillonnage

4.2.2 Éléments de définitions des EO.

A ce stade, nous construisons des estimateurs optimaux à une seule variable de conditionnement en faisant appel à des méthodes d'histogrammes que nous avons présentées de façon détaillée au chapitre 2 (section 2.2.2). Afin de s'assurer d'un calcul efficace des erreurs irréductibles :

$$e_{ir}^{\phi^{DEDM}} = \left\langle \left(\frac{\partial \tau_i}{\partial x_i}{}^{SND} - \frac{\partial \tau_i}{\partial x_i}{}^{EO-DEDM} \right)^2 \right\rangle \quad e_{ir}^{\phi^{CM}} = \left\langle \left(\frac{\partial \tau_i}{\partial x_i}{}^{SND} - \frac{\partial \tau_i}{\partial x_i}{}^{EO-CM} \right)^2 \right\rangle, \quad (4.13)$$

nous allons construire et analyser au préalable l'erreur généralisée de la méthode d'histogramme en fonction de l'échantillonnage de la variable de conditionnement. La notion d'erreur généralisée permet d'apprécier l'aptitude de l'estimateur à s'adapter à de nouvelles valeurs du champ à estimer. Pour réaliser le calcul de cette quantité, nous avons choisi une taille de filtre pour effectuer des tests *a priori* sur une base de données divisée en deux sous-domaines Ω_1 et Ω_2 . La construction de l'estimateur optimal $\partial_i \tau_i^{EO-DEDM} = \left\langle \partial_i \tau_i^{SND} \middle| \phi^{DEDM} \right\rangle_{\Omega_1}$ par la méthode de calcul des histogrammes est effectuée

sur le sous-domaine Ω_1 de la base de données. Ensuite, on calcule l'erreur généralisée de cet estimateur sur l'autre sous-domaine Ω_2 , définie par :

$$E_{gene} = \left\langle \left(\frac{\partial \tau_i^{SND}}{\partial x_i} - \left\langle \partial_i \tau_i^{SND} \middle| \phi^{DEDM} \right\rangle_{\Omega_1} \right)^2 \right\rangle_{\Omega_2}, \quad (4.14)$$

Ce calcul est effectué pour plusieurs échantillonnages des variables de conditionnement ϕ^{DEDM} et ϕ^{GM} allant de 3 à 10^6 . Le résultat de l'impact de l'échantillonnage de l'estimateur optimal $\left\langle \partial_i \tau_i^{SND} \middle| \phi^{DEDM} \right\rangle_{\Omega_1}$ sur Ω_1 , sur l'erreur généralisée E_{gene}^* normalisée par la variance de $\partial_i \tau_i^{SND}$ sur le sous-domaine Ω_2 est représenté sur la figure 4.1. Pour un faible échantillonnage, l'erreur généralisée est supérieure à 1 ce qui indique que l'estimateur est moins performant que la moyenne du champ à estimer. Pour un grand échantillonnage, cette erreur croît car on est en présence d'un phénomène de sur-spécialisation¹ de l'estimateur sur ses points de construction. D'après les résultats de la figure 4.1, la taille optimale d'échantillonnage se situe aux alentours de 100 à 300 échantillons de la variable de conditionnement.

4.2.3 Tests *a priori*

L'échantillonnage minimisant l'erreur généralisée de l'erreur irréductible étant choisi, nous allons tester les performances *a priori* des modèles optimaux. La configuration d'écoulement retenue pour comparer les performances des différents modèles sous-maille est le mélange d'un scalaire dans un écoulement en THIF [1]. Cette base de données est décrite dans le chapitre 2 (section 2.4). Pour rappel, cette configuration est caractérisée par un nombre de Reynolds basé sur les micro-échelles de Taylor tel que $Re_\lambda = 90$ et un nombre de Schmidt tel que $Sc = 1$. Lors des tests *a priori*, les quantités SGE sont émulées par le filtrage explicite des grandeurs SND avec un filtre de type spectral "cutoff" dont l'expression est dans le chapitre 1 à la section 1.2.1.

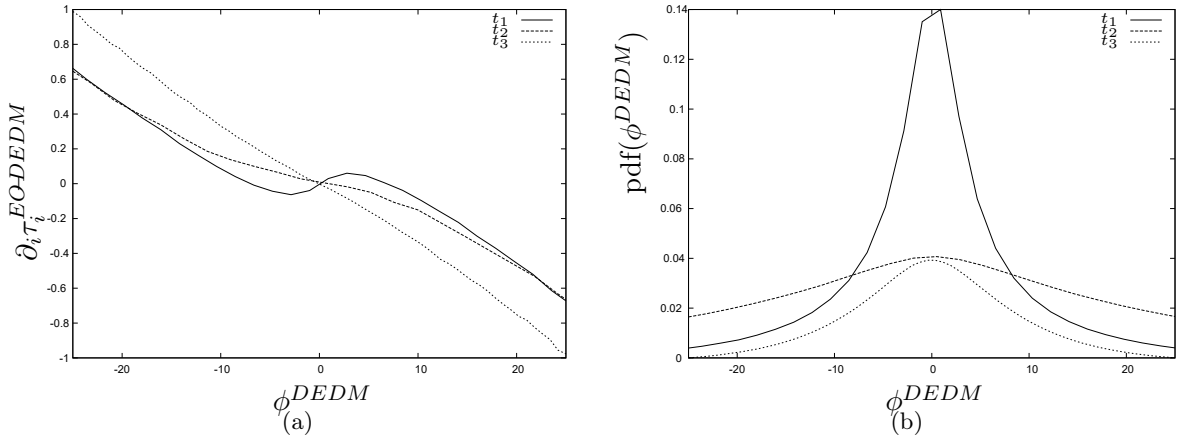


FIGURE 4.2 – Estimateurs optimaux *EO-DEDM* (a) et les fonctions de densité de probabilité (b) associées aux instants de mélange t tel que $t_1 < t_2 < t_3$

Les estimateurs optimaux sont calculés aux différents instants du mélange du scalaire. Nous avons accès à autant d'estimateurs optimaux par modèle que nous avons de pas de temps dans la base de données SND. De plus, à chaque pas de temps, nous disposons de plusieurs tailles de filtre. Par conséquent, les estimateurs optimaux sont fonctions de 3 types de variables : les variables de conditionnement, l'évolution du mélange représenté par la variable de temps t et le rapport de filtrage $\bar{\Delta}/\Delta$:

$$\frac{\partial \tau_i^{EO}}{\partial x_i} (\phi, t, \bar{\Delta}/\Delta). \quad (4.15)$$

1. Ce phénomène est bien connu dans le cadre des méthodes d'apprentissage supervisé qui seront mises en oeuvre dans la suite du chapitre.

Quelques-uns des estimateurs optimaux $\partial_i \tau_i^{EO-DEDM}$ sont tracés sur la figure 4.2 pour différents instants et à un rapport de filtrage $\bar{\Delta}/\Delta$ fixé. On constate que l'estimateur optimal évolue au cours du mélange dans ses zones de plus forte probabilité d'existence (*i.e.* ici au voisinage de 0). Comme nous cherchons à construire des estimateurs capables de servir de modèle sous-maille tout au long du processus de mélange, il faut établir une stratégie de construction qui permette de prendre en compte cette évolution. A cet effet, nous avons ajouté la variance statistique du scalaire résolu $\langle \bar{\theta}'^2 \rangle$ à la définition de l'estimateur. Il existe en effet une fonction scalaire bijective f telle que $t = f(\langle \bar{\theta}'^2 \rangle)$. Cette bijectivité est rendue possible par la décroissance strictement monotone du scalaire en l'absence de forçage. Ce nouveau paramètre $\langle \bar{\theta}'^2 \rangle$ est intégré dans les jeux de variables de conditionnement, ainsi les estimateurs optimaux sont désormais définis par :

$$\frac{\partial \tau_i}{\partial x_i} \Big|_{\bar{\Delta}/\Delta}^{EO-DEDM} = \left\langle \frac{\partial \tau_i^{SND}}{\partial x_i} \Big| \{ \langle \bar{\theta}'^2 \rangle, \phi^{DEDM} \} \right\rangle \quad (4.16)$$

et

$$\frac{\partial \tau_i}{\partial x_i} \Big|_{\bar{\Delta}/\Delta}^{EO-CM} = \left\langle \frac{\partial \tau_i^{SND}}{\partial x_i} \Big| \{ \langle \bar{\theta}'^2 \rangle, \phi^{CM} \} \right\rangle. \quad (4.17)$$

Les performances structurelles sont évaluées en considérant les erreurs quadratiques et irréductibles normalisées par la variance de $\partial_i \tau_i^{SND}$, notées respectivement e_q^* et e_{ir}^* sur la figure 4.3(a).

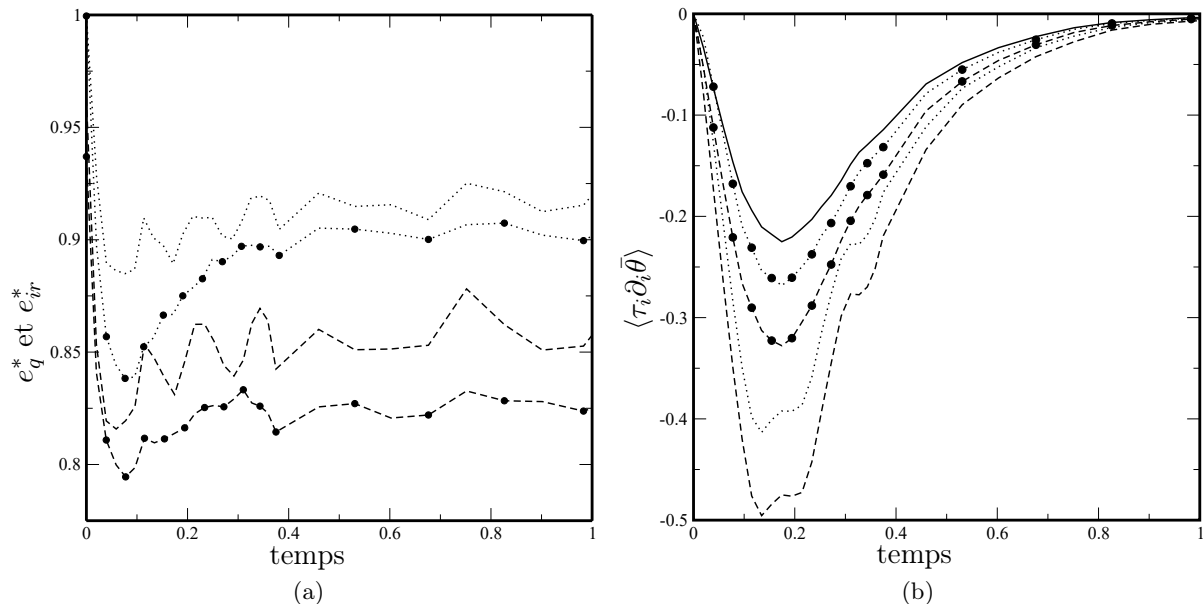


FIGURE 4.3 – Evolution des performances structurelles (a) et fonctionnelles (b) au cours du temps pour les modèles $DEDM$ (.....), CM (-----) et leurs modèles optimaux associés ($\bullet \bullet$). Pour la performance fonctionnelle (b), la dissipation sous-maille exacte est également représentée (—).

Si on compare ces erreurs irréductibles entre elles, on constate que l' $EO-CM$ a une plus petite erreur que l' $EO-DEDM$, donc le jeu de variables ϕ^{CM} est plus performant que le ϕ^{DEDM} . Il est même remarquable de voir que l'erreur quadratique du CM est inférieure à l'erreur irréductible de $EO-DEDM$. Cela indique clairement le faible niveau de performance structurelle du modèle $DEDM$. Ce constat est en accord avec la littérature qui pointe toujours la faible corrélation des modèles fonctionnels avec le terme sous maille exact qui peut s'expliquer par le fait que le vecteur des gradients du scalaire résolu n'est en général pas colinéaire au vecteur sous maille du scalaire passif [36] comme évoqué dans le chapitre 3 à la section 3.1. La comparaison des modèles classiques montre par ailleurs que le CM a une meilleure performance structurelle que le $DEDM$, avec une erreur quadratique plus faible. Cependant, la dissipation sous-maille prédite par le $DEDM$ est plus proche de la dissipation sous-maille issue de la SND filtrée que celle prédite par le CM (figure 4.3(b)) ce qui signifie donc que le $DEDM$ a une

meilleure performance fonctionnelle que le CM . Ce comportement des modèles CM et $DEDM$ a été précédemment observé par Favre & Balarac [29] pour une base de données correspondant à un état de mélange équiprobable du scalaire passif à un nombre de Schmidt de $Sc = 1$ dans un écoulement de THIF statistiquement convergé avec un nombre de Reynolds se basant sur la micro-échelle de Taylor de $Re_\lambda = 160$ dont les caractéristiques sont fournies dans le chapitre 2 à la section 2.4. Les modèles optimaux $EO - CM$ et $EO - DEDM$ offrent par définition (voir chapitre 2 section 2.2) une meilleure performance structurelle que les modèles dont ils sont issus, ici CM et $DEDM$. Il est intéressant de noter que, pour la configuration étudiée, les performances fonctionnelles sont également améliorées par le recours à l'estimateur optimal. Les dissipations sous-maille des modèles optimaux sont en effet plus proches de la dissipation exacte de la SND filtrée que celles des modèles d'origine tout en conservant un comportement sur-dissipatif.

Les conclusions de l'analyse de ces tests *a priori* peuvent être synthétisées comme suit :

- le modèle optimal $EO - CM$ a la meilleure performance structurelle,
- le modèle optimal $EO - DEDM$ a la meilleure performance fonctionnelle,
- et l'estimateur optimal améliore *a priori* les performances structurelles et fonctionnelles du modèle $EO - CM$ (respectivement $EO - DEDM$), par rapport au modèle sous-maille CM (resp. $DEDM$) dont ses variables sont issues.

4.2.4 Tests *a posteriori*

Nous allons vérifier que les conclusions déduites des tests *a priori* se vérifient *a posteriori* lorsque les modèles optimaux sont directement utilisés en modèle sous-maille. Les modèles sous-maille sont testés dans des SGE du scalaire passif de 32^3 points de grille ce qui correspond aux tests *a priori* précédents avec $\bar{\Delta} = 8\Delta$. Le champ de vitesse reste résolu par SND sur une grille de 256^3 points avec le même forçage et par conséquent le même Re_λ . Les modèles optimaux pour la divergence du flux scalaire sous-maille ont été utilisés à partir des tabulations des moyennes conditionnelles construites *a priori*, selon les définitions (4.16) et (4.17).

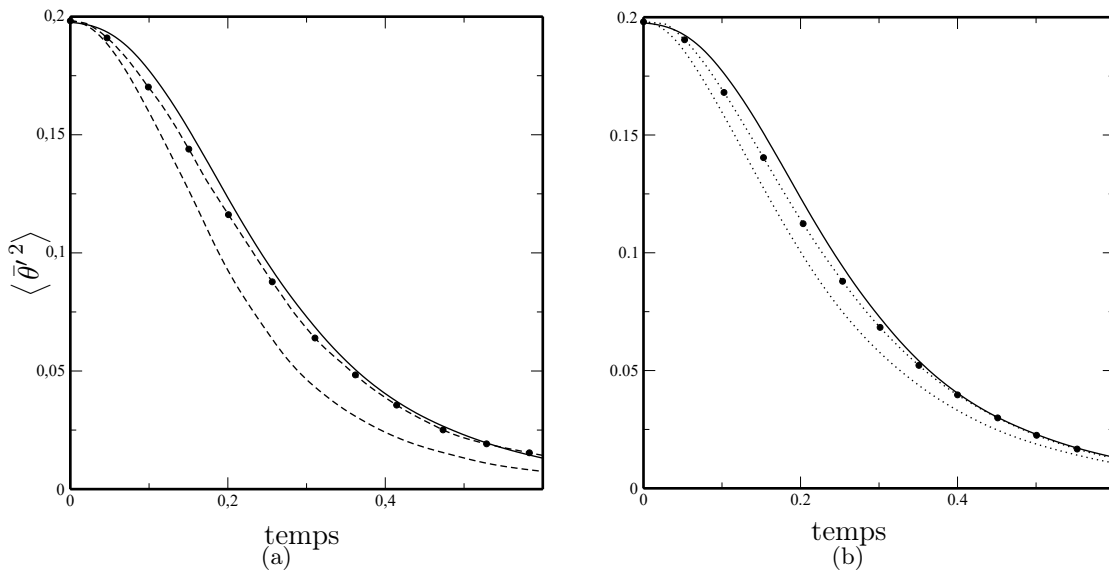


FIGURE 4.4 – Evolution de la variance statistique du scalaire résolu $\langle \bar{\theta}^2 \rangle$ des SGE à $\bar{\Delta} = 8\Delta$. (a) : CM (-----) et $EO - CM$ ($\bullet \bullet$). (b) : $DEDM$ (\cdots) et $EO - DEDM$ ($\bullet \bullet$). Le trait fort représente l'évolution de la variance de la SND filtrée.

Les résultats sur la figure 4.4 comparent *a posteriori* les modèles optimaux avec leurs modèles d'origine et la SND filtrée. Notons que seuls les premiers instants (à $t = 0$) des tests *a priori* (figure 4.3) et *a posteriori* (figure 4.4) partagent exactement le même champ de scalaire. Les tests *a priori* sur les champs postérieurs à l'état initial donnent une indication sur la manière dont le modèle sous-maille se comporterait si on démarrait une SGE de ceux-ci. Ils fournissent donc une tendance globale du modèle

pour la description du processus de mélange mais ils ne peuvent pas être analysés et comparés aux résultats *a posteriori* aux mêmes instants.

On constate que les principales conclusions des essais *a priori* sont également vérifiées *a posteriori*. En effet, les SGE utilisant les modèles *EO-CM* et *EO-DEDM* conduisent à une prédiction de la décroissance de la variance du scalaire résolu plus proche de la SND filtrée que les modèles d'origine, respectivement *CM* et *DEDM* (figure 4.4). Cela correspond à l'amélioration de la performance fonctionnelle observée *a priori*. L'évolution de la variance reste inférieure à celle de la SND filtrée : ce comportement montre que la réduction de la dissipation sous-maille des modèles optimaux, tout en gardant un niveau légèrement sur-dissipatif par rapport à la SND filtrée, permet d'assurer la stabilité des modèles.

4.2.5 Conclusions

Même si les méthodes basiques d'interpolation des tabulations d'histogramme à l'ordre 0 qui ont été utilisées ici pour construire les estimateurs optimaux ne permettent pas de minimiser l'erreur irréductible lorsqu'elle est calculée *a priori* et ne sont sûrement pas optimales lorsqu'elles sont utilisées *a posteriori*, nous avons pu améliorer les performances des modèles sous-maille classiques *CM* et *DEDM* grâce à leurs estimateurs optimaux respectifs, puis nous avons pu montrer la cohérence entre les résultats *a priori* et *a posteriori*. De plus, les résultats *a posteriori* montrent que les estimateurs optimaux utilisés en modèle sous-maille améliorent la prédiction de la variance du scalaire résolu. Cette première approche nous encourage donc à poursuivre l'idée d'utiliser l'estimateur optimal comme modèle sous-maille. Bien entendu, les deux modèles optimaux construits ici sont dédiés à l'écoulement correspondant à la base de données exploitée et nous n'envisageons pas qu'ils fonctionnent dans d'autres cas². Dans la suite, nous allons chercher à construire des estimateurs optimaux plus performants en utilisant :

- un meilleur jeu de variables de conditionnement, qui ne se limite donc pas à reprendre des jeux de variables issus de modèles sous-maille existants,
- une méthode d'apprentissage supervisé visant à s'affranchir des méthodes restrictives de tabulations.

4.3 Choix d'un jeu de variables de conditionnement irréductible et optimal

Nous venons d'établir l'intérêt d'utiliser l'estimateur optimal comme modèle sous-maille pour des variables de conditionnement issues de modèles classiques. Comme évoqué en introduction de ce chapitre, l'utilisation de l'estimateur optimal pose la question du choix des variables de conditionnement à utiliser. Nous nous intéressons ici à la détermination d'un jeu de variables de conditionnement plus efficace *i.e.* qui minimise l'erreur irréductible. Papoulis [70] montre que l'erreur irréductible de l'estimateur optimal est minimale si les variables de conditionnement sont décorréélées entre elles. Ainsi, leur orthogonalité fournira une base sur laquelle projeter efficacement le terme sous-maille exact. Nous nous consacrons donc maintenant à la recherche d'un jeu de variables susceptible de minimiser l'erreur irréductible.

Partons de l'hypothèse que nous désirons améliorer les erreurs irréductibles calculées avec les jeux de variables ϕ^{DEDM} et ϕ^{CM} . Les estimateurs optimaux *EO-CM* et *EO-DEDM*, équations (4.16) et (4.17) sont des fonctions différentielles vectorielles. En développant les divergences des jeux de variables ϕ^{DEDM} et ϕ^{CM} , on fait apparaître les dérivées premières et secondes en espace des composantes de la vitesse et du scalaire. En intégrant ces dérivés dans un jeu complet de variables de conditionnement,

2. L'utilisation de l'hypothèse de bijection entre la variance du scalaire et le temps est un exemple de propriété spécifique au cas du mélange scalaire en THIF qui a été exploitée pour construire les modèles optimaux de cette section

on pourrait s'assurer que l'estimateur optimal calculé par :

$$\left\langle \frac{\partial \tau_i}{\partial x_i}^{SND} \left| \left\{ \bar{\Delta}, \bar{\theta}, \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i}, \frac{\partial^2 \bar{\theta}}{\partial x_i x_j}, \bar{u}_i, \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_i}, \frac{\partial^2 \bar{u}_k}{\partial x_i x_j} \right\} \right. \right\rangle \quad (4.18)$$

a une erreur irréductible inférieure aux estimateurs optimaux des variables de conditionnement utilisées précédemment (4.10) et (4.12). Cependant, le nombre de variables de conditionnement dans (4.18) serait alors de 41 ce qui paraît bien trop important pour un calcul explicite de l'estimateur optimal. Il y a donc un compromis à trouver entre la taille de l'ensemble de variables de conditionnement et sa capacité de projection du terme à estimer. Dans ce but, il a été décidé de s'inspirer des méthodes de construction de Wang *et al.* [96] pour le modèle Dynamic Non Linear Tensor Diffusivity (DNTDM) du scalaire passif. Ce modèle s'appuie sur la décomposition vectorielle de Noll [67], elle-même reprise dans la théorie de la décomposition complète et irréductible des fonctions tensorielles [102]. Nous allons détailler ci-après la formulation du jeu de variables de conditionnement auquel nous avons abouti puis les résultats de l'EO basé sur ce jeu de variables.

4.3.1 Décomposition complète et irréductible de τ_i

Dans l'article original [67], Noll montre que quel que soit \mathbf{M} un tenseur symétrique d'ordre 2 et de dimension n , quel que soit \mathbf{v} un vecteur de dimension n , quelle que soit l'application vectorielle \mathbf{h} qui fait correspondre les espaces des tenseurs d'ordre 2 et des vecteurs tous les deux d'ordre n , avec l'espace des vecteurs d'ordre n , et en supposant qu'il existe n fonctions scalaires $f : \mathbb{R}^{2n} \rightarrow \mathbb{R}$ alors il est possible de décomposer la fonction vectorielle \mathbf{h} sous la forme :

$$\mathbf{h}(\mathbf{M}, \mathbf{v}) = \left(\sum_{k=0}^{n-1} f_k(\mathbf{M}, \mathbf{v}, n) \mathbf{M}^k \right) \mathbf{v}, \quad (4.19)$$

avec $f(\mathbf{M}, \mathbf{v}, n) = f(I_1(\mathbf{M}), \dots, I_n(\mathbf{M}), \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}, \mathbf{v} \cdot \mathbf{M} \mathbf{v}, \dots, \mathbf{v} \cdot \mathbf{M}^{n-1} \mathbf{v})$ où les I_n sont les invariants principaux de \mathbf{M} . Cette décomposition est dite complète car n'importe quelle fonction vectorielle de la forme de \mathbf{h} peut se décomposer sous la forme de la relation (4.19), et irréductible car les monômes du polynôme (4.19) sont indépendants, *i.e.* aucun de ces monômes ne peut être exprimé en fonction d'autres monômes. Cette dernière propriété satisfait la condition de Papoulis [70]. Dans notre cas de figure, nous décomposons le vecteur sous-maille $\boldsymbol{\tau}$ dans un espace physique de dimension 3, donc la décomposition, en notation indicielle, se réduit à un polynôme d'ordre 2 en \mathbf{M} :

$$\tau_i = f_1 v_i + f_2 M_{ij} v_j + f_3 M_{ik} M_{kj} v_j. \quad (4.20)$$

où les fonctions $f_i = f_i(I_M, II_M, III_M, I_v, I_{Mv}, II_{Mv})$ sont trois fonctions scalaires dépendantes des invariants scalaires :

$$\begin{aligned} I_M &= M_{ii}, & II_M &= M_{ik} M_{ki}, & III_M &= M_{ik} M_{kl} M_{li}, \\ I_v &= v_i v_i, & I_{Mv} &= v_i M_{ik} v_k & \text{et} & II_{Mv} = v_i M_{ik} M_{kj} v_j. \end{aligned} \quad (4.21)$$

où la convention de sommation sur les indices répétés a été adoptée. La relation (4.20) est la décomposition complète et irréductible du vecteur sous-maille pour le scalaire passif.

En prenant la divergence de la décomposition (4.20) du vecteur sous-maille et en négligeant³ la variation spatiale des fonctions f_i , il vient une expression de la divergence du flux scalaire sous-maille que nous allons exploiter

$$\begin{cases} \frac{\partial \tau_i}{\partial x_i} &= f_1 \frac{\partial v_i}{\partial x_i} + f_2 \frac{\partial M_{ij} v_j}{\partial x_i} + f_3 \frac{\partial M_{ik} M_{kj} v_j}{\partial x_i} \\ f_i &= f_i(I_M, II_M, III_M, I_v, I_{Mv}, II_{Mv}). \end{cases} \quad (4.22)$$

3. Cette hypothèse forte a été faite pour réduire l'ensemble de conditionnement à 9 variables. Ce choix arbitraire s'est avéré satisfaisant par la suite. De plus, les tests du modèle *DNTDM* qui seront menés à la fin de ce chapitre montreront qu'il est nécessaire d'effectuer ce type d'hypothèse pour le calcul des coefficients dynamiques du modèle.

Compte tenu de cette expression du flux scalaire sous-maille, nous choisissons de postuler un jeu de 9 variables de conditionnement :

$$\phi = \left\{ I_M, II_M, III_M, I_v, I_{Mv}, II_{Mv}, \frac{\partial v_i}{\partial x_i}, \frac{\partial M_{ij} v_j}{\partial x_i}, \frac{\partial M_{ik} M_{kj} v_j}{\partial x_i} \right\}. \quad (4.23)$$

Une analyse dimensionnelle montre qu'en faisant l'hypothèse de coefficients f_i sans dimensions, \mathbf{M} est sans dimension également. Wang *et al.* [96] ont fait le choix de normaliser \mathbf{M} par sa norme, soit $M_{ij} = M_{ij}^*/|\mathbf{M}^*|$ avec $|\mathbf{M}^*| = (2M_{ij}^* M_{ij}^*)^{1/2}$. Compte tenu de cette définition, $\forall \mathbf{M}^* \in \mathbb{S}, II_M = 1/2$. On peut montrer qu'une variable de conditionnement constante n'intervient pas dans le calcul de la moyenne conditionnelle. Par conséquent, l'erreur irréductible avec ou sans cette variable sera inchangée. Cela a pour effet de réduire la taille du jeu de variables $\{\phi\}$ à 8. En ce qui concerne \mathbf{v} , le choix fait dans le *DNTDM* de poser $v_i = \bar{\Delta}^2 |\bar{\mathbf{S}}| \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i}$ est conservé. L'estimateur optimal va permettre de discriminer les ensembles de variables $\{\phi\}_k$ en calculant l'erreur irréductible sur le flux scalaire sous-maille exact construit avec $M_{k,ij}^*$ où l'indice k indique que plusieurs formes vont être proposées pour définir \mathbf{M}^* :

$$e_{ir,k} = \left\langle \left(\frac{\partial \tau_i}{\partial x_i}^{SND} - \left\langle \frac{\partial \tau_i}{\partial x_i}^{SND} \middle| \{\phi\}_k \right\rangle \right)^2 \right\rangle. \quad (4.24)$$

D'un point de vue technique, la moyenne conditionnelle à plusieurs variables sera calculée avec la technique d'histogramme à échantillonnage dynamique décrite dans le chapitre 2 (section 2.2.2). On note \mathbf{G} la matrice associée au gradient de la vitesse résolue telle que $G_{ij} = \partial_i \bar{u}_j$. Le premier tenseur classique \mathbf{M}_1^* est le tenseur des contraintes linéarisées qui s'écrit sous la forme $M_{1,ij}^* = \frac{1}{2} (G_{ij} + G_{ji}) = \bar{S}_{ij}$. Ce choix est celui proposé par Wang *et al.* [96] dans leur décomposition. Les tenseurs auxquels \mathbf{M}_1^* peut être comparé sont des tenseurs quadratiques des gradients des composantes de la vitesse. On définit ainsi \mathbf{M}_2^* comme le terme du modèle sous-maille du gradient pour l'équation de quantité de mouvement (défini à l'équation 1.56). Deux autres termes sont définis comme des parties de la décomposition de \mathbf{M}_2^* en $\bar{\mathbf{S}}$ et $\bar{\mathbf{\Omega}}$ dont l'expression complète est donnée par la relation (3.22). Les tenseurs $M_{k,ij}^*$ considérés sont récapitulés dans la table 4.1. Horiuti [37] a montré sur une base de données de turbulence homogène isotrope avec un nombre de Reynolds basé sur la micro-échelle de Taylor de $Re_\lambda = 87.6$, que le terme \mathbf{M}_3^* a une excellente corrélation avec le tenseur sous-maille de l'équation de Navier-Stokes filtrée.

$M_{1,ij}^*$	$M_{2,ij}^*$	$M_{3,ij}^*$	$M_{4,ij}^*$
\bar{S}_{ij}	$G_{ik} G_{jk}$	$\bar{S}_{ik} \bar{\Omega}_{jk} + \bar{\Omega}_{ik} \bar{S}_{jk}$	$\bar{\Omega}_{ik} \bar{\Omega}_{jk}$

TABLE 4.1 – Variables $M_{k,ij}^*$.

Comme les tenseurs \mathbf{M}_1^* et \mathbf{M}_3^* sont de trace nulle, nous réduisons les jeux des variables de conditionnement à 7 variables

$$\{\phi\}_l = \left\{ III_{M_l}, I_v, I_{M_l v}, II_{M_l v}, \frac{\partial v_i}{\partial x_i}, \frac{\partial M_{l,ij} v_j}{\partial x_i}, \frac{\partial M_{l,ik} M_{l,kj} v_j}{\partial x_i} \right\}. \quad (4.25)$$

Le fait de ne pas tenir compte de l'invariant I_M constitue une approximation pour les choix \mathbf{M}_2^* et \mathbf{M}_4^* mais le fait de négliger systématiquement I_M par la suite permet une comparaison directe des différents choix envisagés pour \mathbf{M}^* . Le jeu de variables $\{\phi\}_l$ paramétrable par les $M_{l,ij}^*$ étant entièrement défini, nous allons calculer *a priori* les différentes erreurs irréductibles $e_{ir,l}$ pour sélectionner le meilleur jeu de variables.

4.3.2 Résultats des tests *a priori*

La base de données choisie pour tester les 4 ensembles de variables $\{\phi\}_k$ est la même que celle utilisée pour la preuve de concept de l'estimateur optimal comme modèle sous-maille en début de ce

chapitre (section 4.2.3).

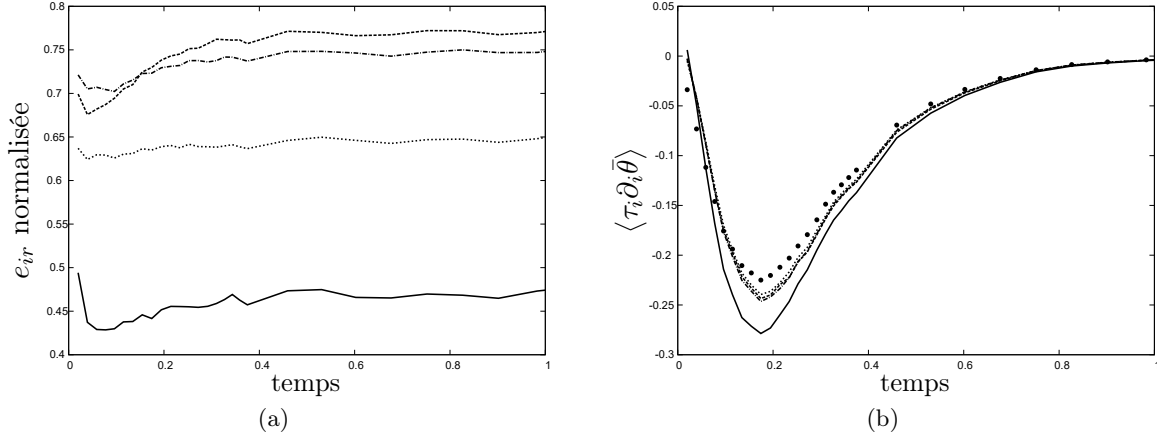


FIGURE 4.5 – Tests *a priori* des variables de conditionnement $\{\phi\}_k$ à la taille de filtre $\bar{\Delta}/\Delta = 8$ en fonction du temps pour la décroissance du scalaire. $M_{1,ij}^*$ (—) $M_{2,ij}^*$ (-----), $M_{3,ij}^*$ (.....), $M_{4,ij}^*$ (-.-.-) et la SND filtrée ($\bullet \bullet$) sur la figure (b) : comparaison des erreurs irréductibles (a) et comparaison des dissipations sous-maille (b).

Le calcul des grandeurs SGE s'effectue toujours par le filtrage explicite de type "cutoff" pour différentes tailles de filtre : $\bar{\Delta}/\Delta = \llbracket 2 : 16 \rrbracket$, avec Δ la taille de maille de la SND.

Les erreurs irréductibles $e_{ir,k}$ sont successivement évaluées aux différentes tailles de filtre et aux différents temps de la base de données. Les résultats sont résumés dans les figures 4.5 et 4.6.

Il apparaît sur la figure 4.5(a) que l'ensemble des variables de conditionnement donnant la plus petite erreur irréductible est l'ensemble $\{\phi\}_1$. En effet, cette erreur est jusqu'à deux fois plus faible que la plus forte erreur associée aux autres choix de jeu de variables de conditionnement ; cette observation est valable pour toutes les bases de données SND de mélange du scalaire et pour toutes les tailles de filtre⁴. Sur la figure 4.5(b) sont comparées les dissipations sous-maille des différents estimateurs optimaux et la dissipation exacte de la SND filtrée. Tous les modèles optimaux évalués présentent de bonnes aptitudes pour prédire le transfert d'énergie sous-maille. L'estimateur optimal calculé avec l'ensemble $\{\phi\}_1$ opère le plus fort transfert, légèrement sur-dissipatif, quel que soit l'instant de mélange, sachant que les premiers instants sont sous-dissipatifs. Si la performance structurelle de l'ensemble $\{\phi\}_1$ peut être qualifiée d'excellente compte tenu du très bas niveau de l'erreur irréductible qui lui est associée, sa performance fonctionnelle traduite par le transfert sous-maille global est la moins bonne des 4 jeux de variables analysés, tout en restant satisfaisante.

La comparaison de la figure 4.5 à la figure 4.3 renforce l'intérêt de notre recherche d'un jeu optimal de variables de conditionnement. La plus faible erreur irréductible atteinte par l'*EO - CM*, estimateur optimal construit à partir du jeu de variables classique associé au *CM*, est en effet égale à 0.79 (pour $t = 1$) alors que le maximum de l'erreur irréductible pour $\{\phi\}_1$ est inférieur à 0.5 (à $t = 1$, on a $e_{irr,1} = 0.43$). De façon générale, les choix de $\{\phi\}_2$ à $\{\phi\}_4$ offrent tous une erreur irréductible maximale (sur l'intervalle de temps t considéré) inférieure à l'erreur irréductible minimale (sur le même intervalle de temps) associée aux choix $\{\phi\}_{CM}$ et $\{\phi\}_{DEDM}$. Les propriétés du choix $\{\phi\}_1$ en termes d'erreur irréductible nous conduisent à retenir par la suite ce jeu de variables de conditionnement que nous notons désormais $\{\phi\}^{Noll}$. Notons que ce choix est celui qui correspond au développement du modèle DNTDM [96] que nous avons précédemment évoqué.

4. Les résultats montrés ici correspondent au cas $\bar{\Delta}/\Delta = 8$ mais la hiérarchie observée est conservée pour les autres tailles de filtre.

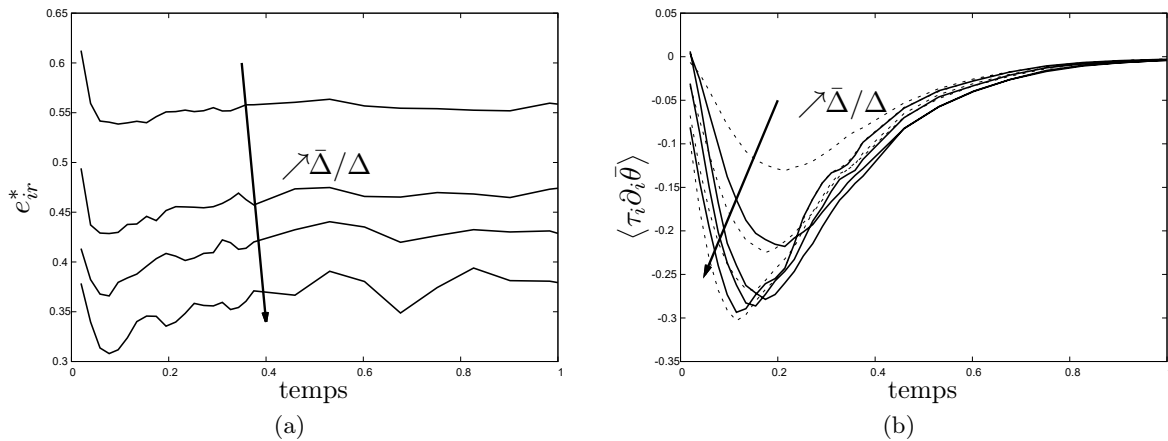


FIGURE 4.6 – Comparaison des erreurs irréductibles de l’ensemble $\{\phi\}^{Noll}$ au cours du mélange (a). Comparaison de la performance fonctionnelle des modèles basés sur l’ensemble $\{\phi\}^{Noll}$ (—) avec la dissipation sous-maille exacte (- - -) (b). Sur les deux figures, les tests sont effectués pour quatre rapports de filtrage $\bar{\Delta}/\Delta = 4, 8, 12$ et 16 .

Nous appliquons au seul modèle optimal associé au jeu de variables $\{\phi\}^{Noll}$ une analyse paramétrique de son comportement lorsque la taille du filtre appliqué à la base de données SND évolue. Sur la figure 4.6(a), on observe que l’erreur irréductible diminue presque de 50% avec l’augmentation de la taille de filtrage. Les phénomènes intermittents de la SND sont lissés avec l’augmentation de la taille du filtrage ce qui confère une moins grande dispersion des valeurs du flux scalaire sous-maille exact. Ainsi, la technique d’estimation est plus efficace et l’erreur diminue. De la même façon, l’estimation du transfert sous-maille devient de plus en plus fidèle au transfert sous-maille exact avec l’augmentation du filtrage à cause de la diminution de l’erreur irréductible. Cependant, l’estimateur optimal tend à devenir sous-dissipatif avec l’augmentation de la taille de filtre. Cette étude de sensibilité à la taille du filtre ne modifie pas notre jugement positif sur l’intérêt de mettre en oeuvre le jeu de variables $\{\phi\}^{Noll}$.

Dans la partie 4.2.4, nous avons présenté des tests *a posteriori* avec les modèles optimaux *EO-CM* et *EO-DEDM* construits par les méthodes d’histogramme. Dans le cas présent, comme nous l’évoquons en préambule de ce chapitre, ces méthodes ne sont pas adaptées pour calculer correctement⁵ l’estimateur optimal à 7 variables de conditionnement dans le but d’effectuer un test *a posteriori*. Au lieu de persévérer dans l’amélioration de la technique d’histogramme en intégrant par exemple, des interpolations d’ordres élevés pour reconstruire l’estimateur optimal à partir d’une tabulation, nous avons opté pour l’emploi de réseaux de neurones qui n’ont pas de limites connues dans leurs capacités à reproduire n’importe quelle fonction non linéaire [16].

Dans la suite, nous allons tester l’ensemble de variables de conditionnement $\{\phi\}^{Noll}$ en remplaçant l’estimateur optimal par un réseau de neurones en vue d’une utilisation *a posteriori*.

4.4 Modèle sous-maille constitué de réseaux de neurones

Dans cette section, nous cherchons à construire un modèle de substitution pour l’estimateur optimal construit avec le jeu de variables $\{\phi\}^{Noll}$. Nous connaissons d’ores et déjà les bornes inférieures de l’erreur atteignable par ce modèle de substitution grâce aux calculs des erreurs irréductibles de la partie précédente. L’enjeu est maintenant de mettre en place une technique performante de calcul de ce modèle dont l’évaluation objective se fera par le biais de sa performance structurelle. Comme le suggère Moreau *et al.* [59], nous nous sommes tournés vers les réseaux de neurones artificiels [78] de type perceptron pour réaliser cette fonction car ils sont :

⁵. Cette technique s’avère cependant suffisante pour discriminer efficacement les performances des jeux de variables par leurs erreurs irréductibles.

- des approximateurs universels puisque les compositions de fonctions élémentaires (en l'occurrence des fonctions sigmoïdes) dans un perceptron permettent, pour un nombre fini de fonctions élémentaires, d'approcher n'importe quelle fonction non-linéaire [16].
- des approximateurs parcimonieux c'est-à-dire capables de reproduire le plus grand nombre de fonctions avec le plus petit nombre de fonctions élémentaires. Cette propriété de parcimonie est la caractéristique principale des réseaux de neurones non bouclés (tels que la valeur des sorties n'influence pas les entrées) à apprentissage supervisé [23].

Les réseaux de neurones ont déjà été utilisés dans le contexte de la simulation ou de la modélisation d'écoulements : contrôle de la turbulence pour la réduction de traînée [49], capture de la dynamique de la turbulence libre [34], modèle de substitution pour reproduire des configurations d'estuaire en océanographie [91] ou encore modèle de condition aux limites pour des surfaces urbaines sous-résolues dans le cadre de SGE de micro-météorologie [27].

Sarghini *et al.* [83] sont, à notre connaissance, les premiers à envisager l'intégration d'un réseau de neurones dans le calcul d'un modèle sous-maille pour les équations de Navier-Stokes filtrées. L'ensemble des variables d'entrée de leur réseau est composé des neuf dérivées spatiales indépendantes des composantes de la vitesse résolue et des six termes de fluctuation croisées :

$$\left\{ \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j}, \bar{u}'_i \bar{u}'_j \right\}. \quad (4.26)$$

Dans leur utilisation des réseaux de neurones, Sarghini *et al.* [83] cherchent à estimer le coefficient dynamique du modèle de similarité de Bardina [6] alors que dans nos travaux, nous cherchons à estimer directement la divergence de $\partial_i \tau_i^{SND}$ avec un jeu de variables plus compact. Après une introduction aux réseaux de neurones que nous allons utiliser, nous évaluerons les performances *a priori* et *a posteriori* du modèle sous-maille construit en appliquant un tel réseau ANN ("Artificial Neural Network"), modèle noté par la suite *ANNM* pour "ANN Model".

4.4.1 Réseau perceptron multi-couches et topologie

Parmi les réseaux de neurones existants, nous nous intéressons au perceptron multi-couches. La forme générale d'un tel réseau est présentée sur la figure 4.7. Sur cette figure, la propagation de l'information va de la gauche vers la droite, de sorte que les noeuds octogonaux représentent les entrées ϕ_i du réseau donc les variables d'entrée de la fonction de substitution et les noeuds elliptiques représentent les sorties donc les valeurs prises par cette fonction. A l'intérieur de ce réseau se trouvent les neurones (matérialisés par les noeuds ronds). Chacune des colonnes de neurones représente une couche j à l'intérieur de laquelle chaque élément est noté N_k^j pour représenter le k ème neurone de la couche j . Le perceptron est un type de réseau où tous les neurones d'une couche j sont connectés aux neurones de la couche $j + 1$. Ces connexions sont matérialisées par les traits reliant les noeuds entre eux. Enfin, les noeuds carrés représentent les biais β^j qui sont également connectés aux neurones. De façon générale, les traits de connexion représentent les paramètres ajustables du réseau de neurones. Ceux reliant les neurones, les entrées et les sorties entre eux, sont des poids. Le neurone N_q^j est relié au neurone N_p^{j+1} par le poids ω_{pq}^j . Pour finir, si cette connexion relie un biais à un neurone ou à une sortie, elle est notée β_k^j et indique que la composante k du biais de la couche j est reliée au neurone k de la couche $j + 1$ ou à la sortie k . Chaque neurone est le lieu de la combinaison linéaire des sorties des neurones de la couche précédente, pondérées par leurs poids, et du biais associé. Sa sortie est l'image du résultat de cette combinaison par la fonction d'activation tangente hyperbolique. Ces opérations sont représentées par la relation

$$N_k^1 = \tanh \left(\sum_j \omega_{kj}^0 \phi_j + \beta_k^0 \right) \quad k \in \llbracket 1; m^1 \rrbracket \quad j \in \llbracket 1; I \rrbracket, \quad (4.27)$$

pour la première couche de neurones et par la relation

$$N_k^{j+1} = \tanh \left(\sum_q \omega_{kq}^j N_q^j + \beta_k^j \right) \quad k \in \llbracket 1; m^{j+1} \rrbracket \quad q \in \llbracket 1; m^j \rrbracket, \quad j \in \llbracket 2; n-1 \rrbracket, \quad (4.28)$$

pour les neurones des couches $j > 1$. Dans ces deux dernières équations, m^i représente le nombre de neurones dans la couche i et I est le nombre d'entrées du réseau. Enfin, les sorties sont évaluées par des opérations similaires à la différence que les fonctions d'activation sont ici linéaires

$$g_k(\phi) = \sum_j \omega_{kj}^n N_j^n + \beta_k^n \quad k \in \llbracket 1; O \rrbracket, \quad j \in \llbracket 1; n \rrbracket, \quad (4.29)$$

et O est le nombre de sorties du réseau. Par ces compositions de fonctions d'activation, le réseau de neurones émule une méta fonction non linéaire dont la complexité est dépendante de l'ensemble des paramètres

$$\{I, O, m^1, \dots, m^n\}. \quad (4.30)$$

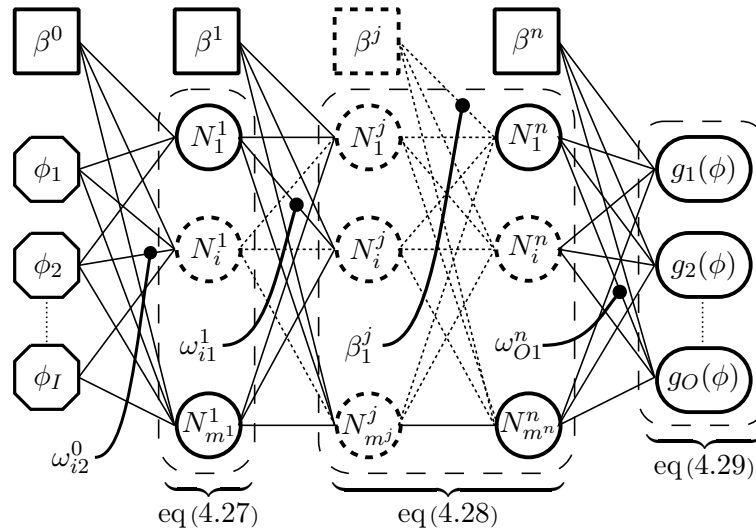


FIGURE 4.7 – Topologie générale d'un réseau de neurones perceptron multicouche entièrement connecté

Ces paramètres régissant les équations (4.27), (4.28), (4.29) régissent la topologie du réseau. L'ensemble (4.30) de cardinal $2 + n$ dépend du nombre de couches de neurones. Un des enjeux, dans la mise en place d'un réseau de neurones, est de choisir les valeurs de ces paramètres afin de construire une méta fonction dont la complexité avoisinerait celle de la fonction inconnue à approximer. Dans le cas bien précis de la création d'un modèle de substitution de l'estimateur optimal construit sur le jeu de variables $\{\phi\}^{Noll}$, il nous faut un modèle à valeurs vectorielles de dimension $I = 7$ vers une sortie scalaire⁶ $O = 1$. Ce sont les premiers éléments de topologie du futur réseau de neurones perceptron multicouche à mettre en place. Pour connaître les capacités d'une topologie de réseau à bien reproduire une fonction à estimer, il faut que le réseau ait subi sa phase d'apprentissage. En effet, avant qu'un réseau ne soit opérationnel, il doit apprendre ce que l'on veut qu'il restitue, *i.e.* on doit adapter ses paramètres pour minimiser une erreur choisie, entre la sortie du réseau et la fonction à estimer. La détermination d'une topologie adéquate passe donc par l'entraînement du réseau [39] pour juger de ses aptitudes à reproduire la fonction à modéliser.

6. Dorénavant, les indices des sorties seront omis.

4.4.2 Apprentissage de l'estimateur optimal

Nous cherchons à modéliser la fonction

$$g^{obj}(\{\phi\}^{Noll}) = \partial\tau_i^{SND}/\partial x_i, \quad (4.31)$$

avec un réseau de neurones de type perceptron multi-couches. Ce réseau est une fonction non-linéaire paramétrable qui va être entraînée (*i.e.* dont les paramètres vont être déterminés) par apprentissage supervisé. L'opération d'apprentissage est une optimisation visant à ajuster les paramètres ω_{pq}^i et b_k^i pour un ensemble (4.30) fixé afin de minimiser l'erreur

$$e = \int_{\Psi} (g^{obj}(\pi) - g^{ann}(\pi))^2 d\pi, \quad (4.32)$$

entre la fonction à modéliser g^{obj} et la fonction de substitution émulée par le réseau de neurones g^{ann} sur le domaine d'existence Ψ . Cependant, nous ne connaissons pas complètement la fonction g^{obj} mais seulement certaines de ses valeurs. D'un point de vue discret, la relation (4.32) devient (l'erreur discrète est désormais notée e_q en référence à l'erreur quadratique caractérisant la performance structurelle) :

$$e_q = \left\langle (g^{obj} - g^{ann})^2 \right\rangle_{\Omega}. \quad (4.33)$$

avec $\Omega = [\{\phi\}_1^{Noll}, \dots, \{\phi\}_r^{Noll}]$ une liste de valeurs numériques des entrées telle que $\Omega \subset \Psi$, à laquelle on associe la liste $G = [g^{obj}(\{\phi\}_1^{Noll}), \dots, g^{obj}(\{\phi\}_r^{Noll})]$ des valeurs numériques de la divergence de flux scalaire sous-maille déduites de la SND. Par conséquent, nous mettons en place la liste de stimuli ⁷

$$J_{\bar{\Delta}/\Delta} = [\{\Omega_1, G_1\}, \dots, \{\Omega_r, G_r\}], \quad (4.34)$$

pour une taille de filtre $\bar{\Delta}/\Delta$ donnée. La mise en place de cette liste s'effectue hors simulation sur une base de données de scalaire passif forcé, statistiquement convergée et dans un champ de vitesse turbulent en THIF. Cette base de données est celle décrite dans le chapitre 2 (section 2.4). Une telle base de données statistiquement stationnaire permet de limiter la quantité de données à prendre en compte pour l'apprentissage par rapport à une base de données simulant une décroissance complète. Par conséquent nous minimisons le cardinal de la liste J .

Les listes $J_{\bar{\Delta}/\Delta}$ sont obtenues par une opération de filtrage explicite avec un filtre spectral de longueur de coupure 4, 8 et 12 sur une base de données SND de 256^3 points de grille, pour le scalaire et les composantes de la vitesse. D'après la propriété des variables de conditionnement de l'estimateur optimal, les grandeurs étant purement locales, la contiguïté spatiale ne doit pas forcément être conservée, donc nous pouvons remplir les listes $J_{\bar{\Delta}/\Delta}$ sans ordre particulier pour ces valeurs. Pour le cas étudié, nous disposons de trois listes de 256^3 stimuli soit plus de 400 millions de valeurs numériques pour construire un modèle de substitution.

La dernière étape, avant de passer à l'entraînement des réseaux, est de préparer les stimuli pour avoir un entraînement efficace et une meilleure adaptabilité du modèle.

Normalisation des stimuli

La normalisation des variables d'entrées est nécessaire pour que l'apprentissage soit efficace sur toutes les valeurs de stimuli et pour éviter la saturation des neurones. Dreyfus *et al.* [23] proposent le changement de variable

$$\tilde{\phi} = \frac{\phi - \langle \phi \rangle}{\sqrt{\langle \phi^2 \rangle - \langle \phi \rangle^2}}. \quad (4.35)$$

7. Couples d'entrées/sorties de la fonction à approximer, calculés *a priori* sur des bases de données SND

En ce qui concerne la sortie du réseau, sa normalisation est également avantageuse pour faciliter l'entraînement. Le changement de variable utilisé pour les entrées (4.35) n'est pas applicable dans notre cas car la sortie n'est connue que pour des études *a priori*. Nous cherchons plutôt à construire un terme de normalisation ayant le même comportement que la divergence du flux scalaire sous-maille exact. Nous avons finalement retenu comme terme de normalisation des sorties du réseau l'écart type de la variable $div(\mathbf{v})$ de l'ensemble $\{\phi\}^{Noll}$:

$$C_{norm} = \bar{\Delta}^2 \sqrt{\left\langle \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \left(|\bar{S}| \frac{\partial \bar{z}}{\partial x_i} \right) \right)^2 \right\rangle - \left\langle \frac{\partial}{\partial x_i} \left(|\bar{S}| \frac{\partial \bar{z}}{\partial x_i} \right) \right\rangle^2}, \quad (4.36)$$

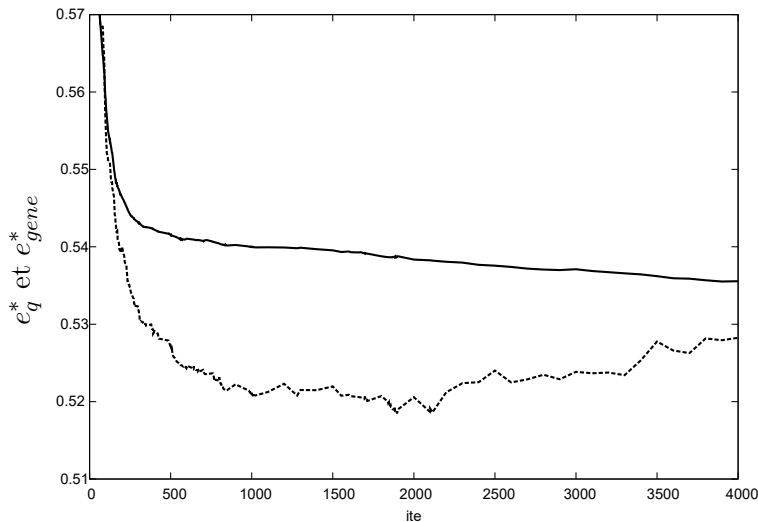


FIGURE 4.8 – Evolution des erreurs d'entraînement e_q^* (—) et de généralisation e_{gene}^* (-----) au cours de l'apprentissage du réseau défini par l'ensemble de paramètres $\{7, 1, 15, 15\}$ selon la définition (4.30)

Des tests *a priori* de cette normalisation de la divergence du flux scalaire sous-maille exact, sur une base de données de scalaire forcé, montrent que l'intervalle de variation des valeurs reste unitaire quelle que soit la longueur de coupure du filtre spectral. En définitive, la liste de stimuli (4.34) est modifiée pour tenir compte des différents changements de variables et, par conséquent, le modèle de substitution g^{ann} est construit avec la liste de stimuli :

$$J_{\bar{\Delta}/\Delta}^* = \left[\left\{ \tilde{\Omega}_1, G_1/C_{norm} \right\}, \dots, \left\{ \tilde{\Omega}_r, G_r/C_{norm} \right\} \right], \quad (4.37)$$

pour $\bar{\Delta}/\Delta \in \{4, 8, 12\}$.

Le modèle ANNM

Nous utilisons la bibliothèque informatique "Fast Artificial Neural Network" (FANN) [66]. L'algorithme d'optimisation des paramètres du réseau sélectionné pour ces travaux est à rétropropagation d'erreur de type RPROP [75]. La bibliothèque est interfacée afin de :

- lire les stimuli pour l'apprentissage,
- construire facilement la topologie du réseau,
- pouvoir pratiquer la technique de « l'arrêt prématuré d'apprentissage » afin d'éviter le phénomène de sur-apprentissage [53].

La stratégie mise en place pour éviter ce problème spécifique du sur-apprentissage est la suivante. L'ensemble complet des stimuli est aléatoirement divisé en deux sous-ensembles : l'ensemble d'entraînement servant à l'apprentissage lui-même et l'ensemble de test. Au cours de l'apprentissage sur l'ensemble d'entraînement, l'erreur quadratique (4.33) d'entraînement e_q^* (où l'exposant * indique qu'il s'agit d'une erreur sur les quantités normalisées) décroît comme sur la figure 4.8. Parallèlement à l'apprentissage,

nous calculons l'erreur quadratique du réseau sur les stimuli de l'ensemble de test. Cette erreur, appelée erreur de généralisation e_{gene}^* , est indicative du sur-apprentissage du réseau. Ce phénomène, illustré sur la figure 4.8, est caractérisé par l'accroissement de l'erreur généralisée e_{gene}^* après l'itération 2100, tandis que l'erreur d'entraînement continue de décroître⁸. Dans le cas étudié, le réseau entraîné à la 2100^{ème} itération est considéré comme le meilleur réseau issu de l'entraînement réalisé.

Nous avons effectué plusieurs séries d'entraînement sur plusieurs topologies allant de 1 à 4 couches de neurones. Parmi ces différentes topologies, nous avons fait varier le nombre de neurones dans chacune des couches. Les réseaux contenant les plus grands nombres de neurones pour un nombre de couches fixées sont $\{7, 1, 20\}$, $\{7, 1, 60, 30\}$, $\{7, 1, 20, 15, 10\}$ et $\{7, 1, 20, 15, 10, 10\}$. Pour chacun des réseaux nous avons effectué plusieurs séries d'entraînement car l'algorithme d'apprentissage par rétro-propagation d'erreur RPROP est basé sur une méthode de descente de gradient améliorée [75] et les résultats fournis par cette méthode d'optimisation peuvent dépendre de l'initialisation des paramètres en début d'apprentissage. L'initialisation des paramètres du réseau est effectuée par la méthode suggérée par Nguyen & Widrow [64] qui diminue le temps de convergence. Elle est basée sur une initialisation aléatoire des paramètres, selon une loi uniforme, entre des bornes bien choisies. Par conséquent, chaque topologie testée a été entraînée plusieurs fois, pour évaluer différentes initialisations.

Il apparaît à l'issue de l'ensemble de ces tests qu'un réseau de topologie $\{7, 1, 15, 15\}$ est celui qui présente la meilleure aptitude à reproduire la liste de stimuli $J_{\bar{\Delta}/\Delta}^*$ de la relation (4.37). Ce réseau constitue donc désormais le nouveau modèle sous-maille pour le scalaire passif qui va être testé par la suite et sera appelé Artificial Neural Network Model (*ANNM*). Rappelons qu'il constitue un modèle de substitution pour l'estimateur optimal mis en oeuvre avec le jeu de variables de conditionnement $\{\phi\}^{Noll}$.

4.5 Performance du modèle *ANNM*

Un nouveau modèle sous-maille pour le scalaire *ANNM* vient d'être construit grâce aux informations de la base de données de scalaire forcé. Dans cette partie, nous allons effectuer des tests *a priori* de ce modèle sur cette même base de données afin de valider son apprentissage et de vérifier ses performances en le comparant aux modèles *DEDM* et *DNTDM*. Le *DEDM* est le modèle fonctionnel de référence et le *DNTDM* est le modèle algébrique et structurel se basant sur des variables similaires à celle de *ANNM*.

Par la suite, nous utiliserons ces modèles dans trois cas de SGE du scalaire passif sur des grilles de 64^3 points. La première SGE sera initialisée par la base de données utilisée pour l'apprentissage du *ANNM* et pour le test *a priori* précédent. Nous choisirons de garder les mêmes caractéristiques de forçage que celles employées pour atteindre la convergence statistique du champ scalaire initial. Ensuite nous examinerons à quel point le modèle *ANNM* peut permettre de résoudre des SGE de scalaire sur d'autres configurations d'écoulement assez voisines. Nous allons donc utiliser le même champ initial que précédemment mais sans forçage sur le champ de scalaire. Enfin, nous testerons une dernière simulation en partant d'un champ scalaire initialisé aléatoirement selon la méthode de Eswaran & Pope [28].

Le modèle *DEDM* auquel nous comparerons ci-après le modèle *ANNM* a été précédemment défini (section 1.2.2 et 4.2.1). Nous devons détailler en revanche l'expression du modèle *DNTDM* qui n'a pas encore été fournie. La formulation de ce modèle repose sur la décomposition des fonctions vectorielles (4.20) avec $M_{ij} = \bar{S}_{ij}/|\bar{S}|$ et $v_i = \bar{\Delta}^2 |\bar{S}| \partial_i \bar{\theta}$. Nous avons montré que ce choix était performant au sens de l'erreur irréductible. De plus le modèle ainsi construit :

$$\tau_i^{DNTDM} = -\chi_1 \bar{\Delta}^2 |\bar{S}| \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i} - \chi_2 \bar{\Delta}^2 \bar{S}_{ik} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_k} - \chi_3 \bar{\Delta}^2 \frac{\bar{S}_{ik} \bar{S}_{kl}}{|\bar{S}|} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_l}, \quad (4.38)$$

8. Dans le cas présent, la normalisation des erreurs s'effectue par la variance respective des ensembles de test et d'entraînement donc elle n'est pas la même ce qui explique que l'erreur de généralisation soit inférieure à l'erreur d'entraînement.

inclut le classique *DEDM*. Les deux termes supplémentaires, à la manière d'un modèle mixte, apportent des corrections sur le caractère sur-dissipatif du *DEDM*. La méthode de résolution des coefficients dynamiques est dérivée de la méthode de Germano [33] avec la procédure des moindres carrés de Lilly [51]. L'application de cette procédure de calcul de constante dynamique revient à résoudre le système linéaire

$$\begin{pmatrix} P_i P_i & P_i Q_i & P_i R_i \\ Q_i P_i & Q_i Q_i & Q_i R_i \\ R_i P_i & R_i Q_i & R_i R_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \\ \chi_3 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} P_i L_i \\ Q_i L_i \\ R_i L_i \end{pmatrix} \quad (4.39)$$

avec

$$\left\{ \begin{array}{l} P_i = \hat{\Delta}^2 |\hat{S}| \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial x_i} - \overline{\Delta^2 |\bar{S}|} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i} \\ Q_i = \hat{\Delta}^2 \hat{S}_{ik} \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial x_k} - \overline{\Delta^2 \bar{S}_{ik}} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_k} \\ R_i = \hat{\Delta}^2 \frac{\hat{S}_{ik} \hat{S}_{kl}}{|\hat{S}|} \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial x_l} - \overline{\Delta^2 \frac{\bar{S}_{ik} \bar{S}_{kl}}{|\bar{S}|}} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_l} \\ L_i = \widehat{\theta} \bar{u}_i - \hat{\theta} \hat{u}_i \end{array} \right. \quad (4.40)$$

en chaque point du domaine. Le calcul des coefficients χ_i se fait par l'inversion de la matrice 3×3 . Cette matrice est composée des termes irréductibles de la décomposition de Noll, donc elle est de rang 3 et, par conséquent, est toujours inversible. Lors des tests de ce modèle, nous avons eu besoin d'appliquer une méthode de lissage au calcul des coefficients pour éviter des instabilités conduisant à une divergence rapide du calcul. Nous avons ainsi systématiquement remplacé la valeur locale des coefficients par la moyenne spatiale de ces coefficients calculée sur l'ensemble du domaine de calcul. Cette opération est analogue à l'hypothèse faite précédemment dans la construction du jeu de variables optimales de Noll, où nous avons négligé les variations spatiales des fonctions f_i pour obtenir (4.22).

Tous les modèles sous-maille à analyser sont maintenant définis. Nous étudions dans un premier temps leurs performances via des tests *a priori* réalisés sur la base de données d'entraînement du modèle *ANNM*. Ces résultats vont nous permettre de juger de la qualité de l'entraînement réalisé pour *ANNM* et de situer ses performances par rapport à celles des deux modèles *DEDM* et *DNTDM*.

4.5.1 Tests *a priori* sur la base de construction du *ANNM*

Nous examinons les performances fonctionnelles et structurelles du *DNTDM*, du *DEDM* et de *ANNM*. Les performances structurelles mesurées avec l'erreur quadratique sont calculées pour les trois modèles ainsi que leurs erreurs irréductibles pour évaluer leurs erreurs des formes fonctionnelles dont les définitions sont données dans le chapitre 2 (section 2.2). Rappelons les jeux de variables de conditionnement associés à chaque modèle :

- le jeu de variables de conditionnement est $\{\phi\}^{Noll} = \{\phi\}^{ANNM}$.
- le jeu de variables de conditionnement $\{\phi\}^{DEDM}$ pour le *DEDM* est exactement celui de l'équation (4.10).
- pour pouvoir correctement comparer l'erreur quadratique du *DNTDM* avec une erreur irréductible issue d'un jeu de variables de conditionnement représentatif de ses variables, nous avons également construit le jeu de variables de conditionnement

$$\{\phi\}^{DNTDM} = \left\{ \bar{\Delta}^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(|\bar{S}| \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i} \right), \bar{\Delta}^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{S}_{ik} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_k} \right), \bar{\Delta}^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\bar{S}_{ik} \bar{S}_{kl}}{|\bar{S}|} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_l} \right) \right\}. \quad (4.41)$$

Ce jeu de variables est exactement $\{\phi\}^{ANNM}$ sans les invariants de \mathbf{M} et \mathbf{v} . Il est le jeu de variables de conditionnement pour calculer l'erreur irréductible du *DNTDM* de Wang *et al.* [96] avec la procédure de lissage des coefficients dynamiques.

Les résultats *a priori* sur la performance structurelle 4.9(a) montrent que l'erreur de la forme fonctionnelle du *ANNM* est faible puisque son erreur quadratique est proche de l'erreur irréductible de son jeu de variables $\{\phi\}^{ANNM}$. Ce résultat confirme la bonne convergence de l'entraînement du réseau et montre que les réseaux de neurones sont, pour ce qui est du test *a priori*, des fonctions de substitution performantes pour modéliser la divergence du vecteur sous-maille du scalaire passif. Sur cette base de données, les performances structurelles des modèles *DEDM* et *DNTDM* sont respectivement 50% et 75% au-dessus de l'erreur quadratique de *ANNM*. Notons que *ANNM* est aussi performant que le modèle optimal construit avec les variables $\{\phi\}^{DNTDM}$ car son erreur quadratique est voisine de l'erreur irréductible calculée avec ce jeu de variables de conditionnement.

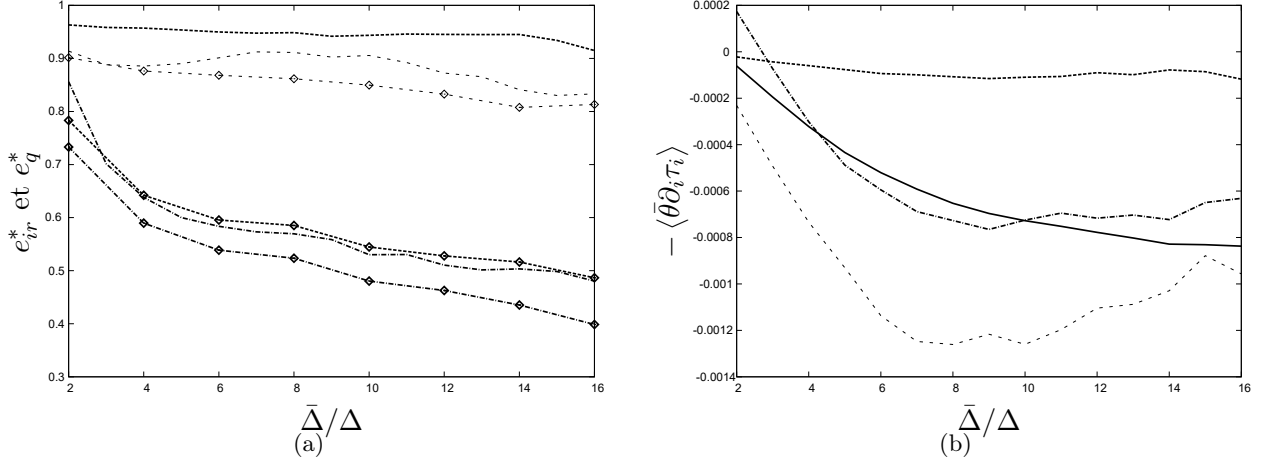


FIGURE 4.9 – Erreur irréductible et quadratique normalisées des modèles *DEDM* (- - -), *DNTDM* (- · - · -) et *ANNM* (· · · · ·) et des modèles optimaux (◊ ◊) en fonction des tailles de filtre (a) et dissipation sous-maille des modèles en comparaison avec la dissipation sous-maille exacte (—) en fonction de la taille de filtre

Il est intéressant de noter que l'ajout des invariants à l'ensemble $\{\phi\}^{DNTDM}$ permettant de passer à $\{\phi\}^{ANNM}$, permet de réduire l'erreur irréductible de près de 10 %. Notons que *DEDM* a une moins bonne performance structurelle que *DNTDM* et une faible erreur de forme fonctionnelle montrant que sa procédure dynamique est très adaptée.

Le modèle *DNTDM* respecte la décomposition vectorielle de Noll, donc l'écart entre son erreur quadratique et son erreur irréductible ne provient pas de la combinaison linéaire des monômes de variables $div(\mathbf{v})$, $div(\mathbf{M}\mathbf{v})$ et $div(\mathbf{M}^2\mathbf{v})$, mais plutôt de la procédure de calcul des coefficients dynamiques qui n'est pas adaptée car elle ne tient pas compte des invariants. Nous mettons en évidence ici un important potentiel d'amélioration de la procédure de calcul des coefficients dynamiques χ_i . Ce potentiel pourra être exploité en utilisant les invariants des variables \mathbf{v} et \mathbf{M} , ce que nous aborderons dans le chapitre 5.

Sur la figure 4.9(b), les performances fonctionnelles des modèles sous-maille sont évaluées en comparant leur dissipation sous-maille avec la dissipation sous-maille exacte de la SND filtrée. Le modèle *DNTDM* montre une sous-prédiction de la dissipation sous-maille tandis que *DEDM* conduit à une sur-prédiction. En revanche, *ANNM* montre de bons niveaux de dissipation sous-maille avec une légère tendance sur-dissipative pour des tailles de filtre comprises entre $\bar{\Delta}/\Delta = 4$ et 10. Comme *ANNM* est construit sur la base de performances structurelles (minimisation de l'erreur quadratique (4.33)), ses bonnes performances fonctionnelles n'étaient pas nécessairement attendues.

Pour une analyse plus fine des performances fonctionnelles du modèle *ANNM*, nous avons tracé les densités de probabilités jointes entre le transfert sous-maille⁹ exact de la SND filtrée et le trans-

9. Comme nous n'avons pas accès aux composantes du vecteur sous-maille de *ANNM*, nous ne pouvons pas calculer localement le terme de dissipation sous-maille $\tau_i \partial_i \bar{\theta}$. Donc nous montrons la densité de probabilité jointe du transfert sous-maille $\bar{\theta} \partial_i \tau_i$ qui est la somme de la diffusion et de la dissipation sous-maille.

fert sous-maille des modèles *DEDM* et *ANNM*¹⁰ sur la figure 4.11. Nous proposons de détailler les transferts décrits par ces densités de probabilité jointe avec le schéma 4.10 :

- la première bissectrice des quadrants (AA') et (CC') montre les lieux qu'occuperaient la représentation de la densité de probabilité jointe du modèle au transfert sous-maille idéal.
- le quadrant (AA') représente l'existence de transfert des échelles résolues vers les échelles modélisées (transfert direct) pour le modèle exact de la SND filtrée et le modèle testé.
- le quadrant (CC') représente l'existence de transfert des échelles modélisées vers les échelles résolues (transfert inverse).

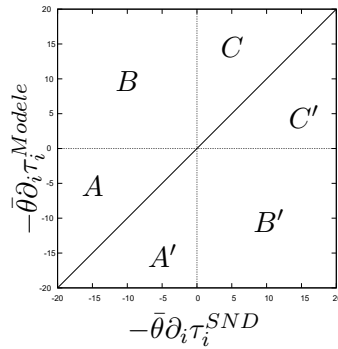


FIGURE 4.10 – Schéma explicatif des zones de probabilité d'existence des transferts sous-maille entre le modèle exact de la SND filtrée et un modèle à tester.

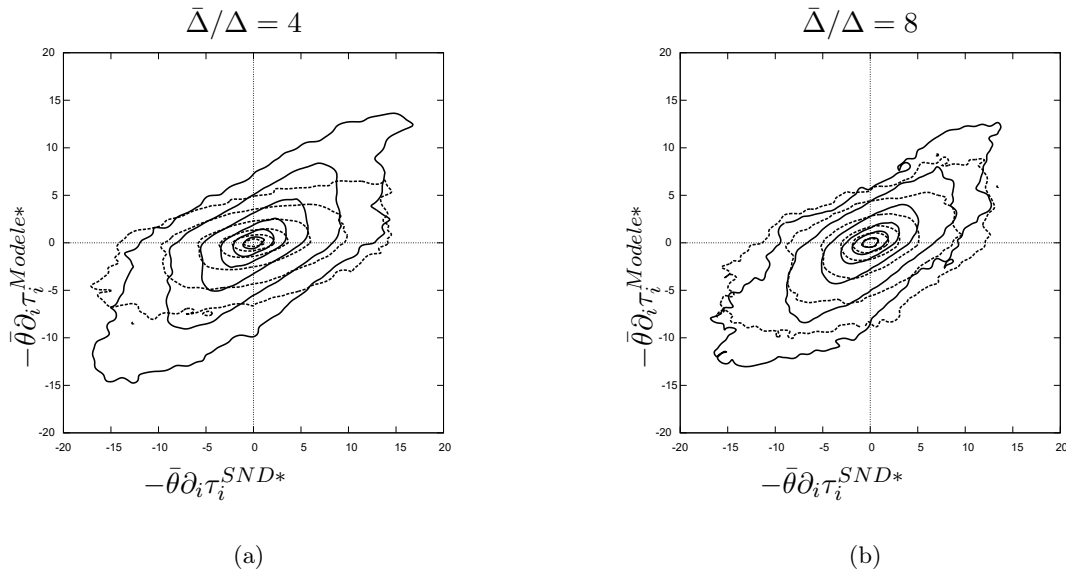


FIGURE 4.11 – Fonction de densité de probabilité jointe entre le transfert sous-maille exact et le transfert sous-maille du *DEDM* (-----) et du *ANNM* (—) pour plusieurs tailles de filtre $\bar{\Delta}/\Delta = 4, 8$. la forme étoilée signifie que le transfert sous-maille est normalisé par l'écart type du transfert sous-maille exact. Les lignes de niveaux vont d'une densité de probabilité de 0.0001 % à 10 % avec une progression géométrique de raison 10.

¹⁰. Le modèle *DNTDM* n'est pas représenté car ses performances fonctionnelles mesurées au préalable sur la figure 4.9 n'encouragent pas à le comparer plus finement.

Dans ces deux quadrants, les zones (A) et (C) montrent un sous-transfert du modèle par rapport au terme exact alors que les zones (A') et (C') sont les lieux d'un sur-transfert.

- le quadrant (B) montre que le modèle effectuerait des transferts inverses pendant que le modèle exact ferait l'opposé. La probabilité d'existence de transfert dans ce quadrant est la plus pénalisante de la part d'un modèle du point de vue de la stabilité.
- le quadrant (B') montre le phénomène inverse à (B), son effet n'est pas désiré non plus, mais il est moins pénalisant sur la stabilité d'une SGE.

Les résultats des modèles sont représentés à deux tailles de filtre, $\bar{\Delta}/\Delta = 4$ et 8, se trouvant dans la zone des bonnes performances fonctionnelles du *ANNM*. Les résultats sont similaires dans les deux cas tout en étant plus marqués dans le cas $\bar{\Delta}/\Delta = 4$. On constate que *ANNM* a une densité de probabilité jointe davantage symétrique par rapport à la première bissectrice que *DEDM* ce qui illustre un meilleur comportement de *ANNM* en terme de transfert sous-maille. Les valeurs extrêmes des transferts dans les quadrants (B) et (B') pour *ANNM* diminuent par rapport à *DEDM* même si *ANNM* augmente ses probabilités de transfert dans certaines de ces mêmes zones. Dans le quadrant (CC'), *ANNM* montre une plus forte probabilité au sur-transfert inverse du fait d'une plus forte probabilité de transfert au-dessus de la première bissectrice, alors que le quadrant (AA') est en sous-transfert direct du fait d'une plus forte probabilité de transfert en-dessous de la première bissectrice. Bien entendu, nous ne pouvons pas discuter de la stabilité du modèle "localement" puisque nous prenons en compte la diffusion sous-maille dans les résultats de ces figures. En conclusion, les comportements locaux des transferts sous-maille et le niveau de dissipation sous-maille du *ANNM*, montrent sur les tests *a priori* les performances fonctionnelles accrues de *ANNM* par rapport au *DNTDM* et au *DEDM*.

4.5.2 Tests *a posteriori*

Nous nous proposons maintenant d'analyser les comportements *a posteriori* des modèles *ANNM*, *DEDM* et *DNTDM* sur des SGE de scalaire passif.

Dans le cadre de ces tests *a posteriori*, nous allons analyser en particulier deux quantités relatives à l'évolution du scalaire résolu : La variance statistique $\langle \bar{\theta}^2 \rangle$ et l'ensrophie du scalaire résolu $1/2 \langle \partial_i \bar{\theta} \partial_i \bar{\theta} \rangle$. Dans chacune des simulations, le champ de vitesse est résolu en SND sur une grille de 256^3 points avec un forçage de type Alvelius [1]. Le caractère passif du scalaire permet de résoudre simultanément plusieurs champs de scalaire avec un même champ de vitesse. De plus, le solveur étant de type pseudo-spectral, les erreurs de discrétisation sont absentes. Par conséquent, les seules différences entre les évolutions des scalaires que nous allons observer, sont directement dues aux modèles sous-maille. Enfin, nous allons résoudre un scalaire pour un nombre de Schmidt tel que $Sc = 1$ en SND et le filtrer sur la grille SGE afin d'avoir une évolution de référence pour chaque quantité examinée.

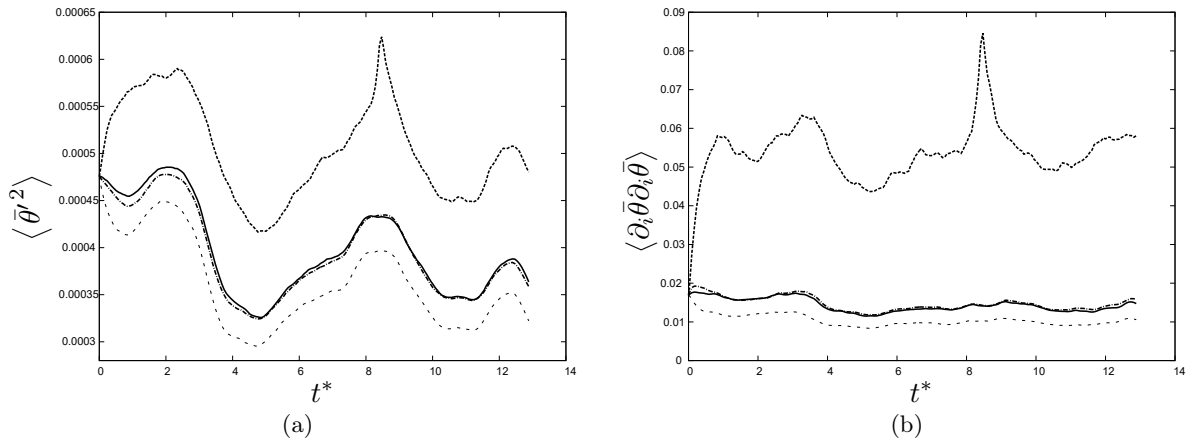


FIGURE 4.12 – Evolution de la variance du scalaire résolu (a) et évolution de l'ensrophie du scalaire (b), pour les SGE réalisées avec les modèles *DEDM* (- - -), *DNTDM* (- . - .) et *ANNM* (· · · ·) et pour la SND filtrée (—).

Les évolutions des SGE de scalaire sur des grilles de 64^3 points, avec les champs initiaux utilisés pour les tests *a priori* avec un forçage sur le scalaire et avec les modèles sous-maille *DEDM*, *DNTDM* et *ANNM*, sont présentées dans les figures 4.12 et 4.13. Dans la figure 4.12, nous étudions l'évolution temporelle du scalaire passif résolu en traçant la variance statistique (figure 4.12(a)) et l'enstrophie (figure 4.12(b)) du scalaire résolu. Le paramètre t^* d'évolution temporelle est la normalisation du temps physique de la simulation par le rapport de la longueur de l'échelle intégrale sur l'écart type de la norme de la vitesse. Sur ces deux quantités, on constate une excellente prédiction du scalaire par *ANNM* en comparaison avec l'évolution du scalaire de la SND filtrée. Comme attendu *a priori*, la très bonne prédiction de la dissipation sous-maille de *ANNM* à la taille de filtre $\bar{\Delta}/\Delta = 4$, qui est représentative de la résolution 64^3 , se traduit par la bonne évolution de la variance de scalaire résolu sur la figure 4.12(a) tout au long de la SGE. On peut également relever les comportements des modèles *DEDM* et *DNTDM*, respectivement sur et sous-dissipatif à cette taille de filtre, aussi bien *a priori* qu'*a posteriori*. Ce constat est confirmé par l'évolution de l'enstrophie de scalaire résolu (figure 4.12(b)) qui est bien prédite par *ANNM*, sous-prédite par *DEDM* et sur-prédite par *DNTDM*. En ce qui concerne les grandeurs locales, nous avons tracé sur la figure 4.13(a) à l'instant $t^* = 4.15$ le spectre des scalaires des SGE et de la SND. Cet instant est postérieur aux phases transitoires d'établissement des régimes permanents des SGE.

On constate que les modèles sous-maille n'influent que sur les plus petites échelles résolues du scalaire et que les conclusions tirées sur l'évolution temporelle des quantités statistiques se retrouvent sur les grandeurs instantanées. En effet, le spectre du scalaire de la SGE avec *ANNM* est le plus proche de la SND tout en gardant des niveaux énergétiques de fluctuations de scalaire inférieures à la SND pour chacun des nombres d'onde de la variance du scalaire. La sur-dissipation du *DEDM* se traduit ici par la sous-prédiction de la fluctuation des petites échelles de scalaire et la sous-prédiction de la dissipation du *DNTDM* se traduit par l'accumulation d'énergie aux plus petites échelles. Ce modèle *DNTDM* ne prédit pas assez de transfert des échelles résolues vers les échelles modélisées comme nous l'avons remarqué *a priori*.

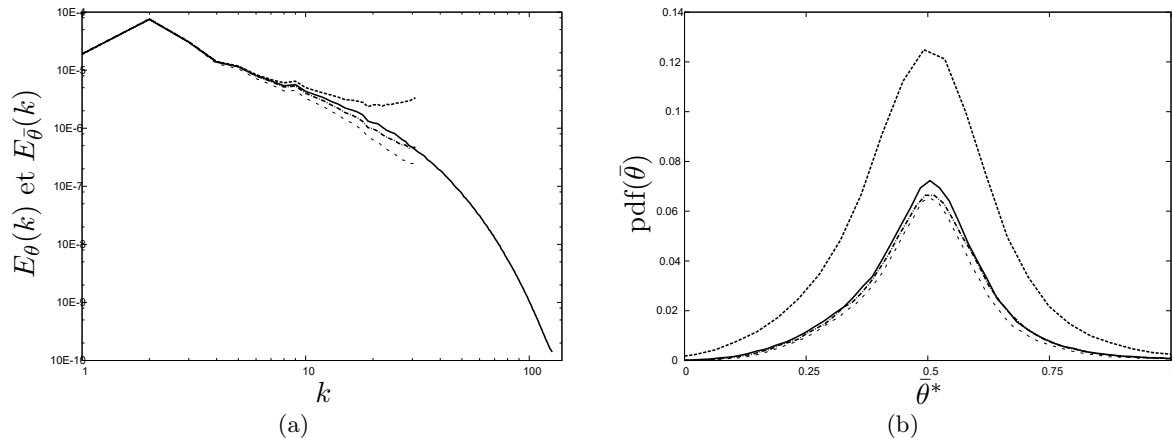


FIGURE 4.13 – Spectres (a) et densité de probabilité (b) pour le scalaire à $t^* = 4.15$. *DEDM* (- - -), *DNTDM* (.....) et *ANNM* (-.-.-) comparés à la SND (a) et SND filtrée (b) (—).

Des conclusions tout à fait comparables sont à tirer des fonctions de densité de probabilité à ce même instant 4.13(b). La sur-prédiction de variance du scalaire pour la SGE du *DNTDM* se retrouve sur la large plage des valeurs de sa fonction de densité de probabilité. De la même façon, la sous-prédiction de la variance du scalaire de la SGE avec *DEDM* est retranscrite par la sous-évaluation des probabilités d'existence des valeurs de scalaire. Enfin, la fonction de densité de probabilité de scalaire de la SGE résolue avec *ANNM* est celle se rapprochant le plus de la SND filtrée.

En conclusion, les tests *a priori* et *a posteriori* sont cohérents et montrent d'une part que le modèle *ANNM* a été bien entraîné et d'autre part qu'il a de bonnes capacités prédictives de l'évolution

des quantités statistiques d'un scalaire dans une SGE similaire aux données utilisées pour l'entraîner. Dans les deux prochains tests *a posteriori* nous allons modifier la physique du mélange et les conditions initiales pour observer comment le modèle *ANNM* se comporte lorsqu'il est appliqué à la prédiction d'écoulements différents de celui à partir duquel il a été construit.

4.5.3 Tests *a posteriori* du modèle *ANNM* sur d'autres écoulements

L'effort consacré à la normalisation des variables d'entrée du réseau de neurones (4.35) et sa sortie (4.36) nous permet de penser que *ANNM*, à la façon d'un modèle algébrique classique, peut s'adapter à des physiques d'écoulement différentes de celle qui a servi à calibrer le modèle.

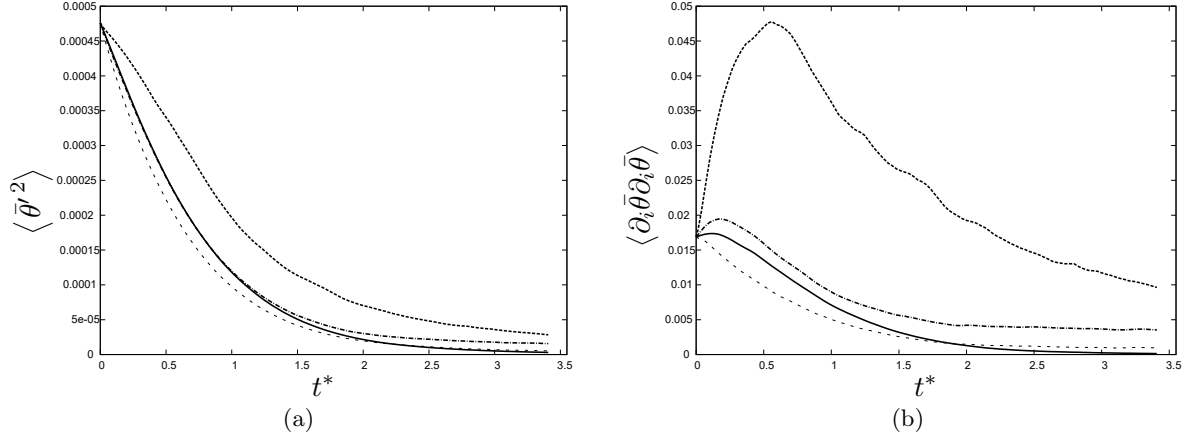


FIGURE 4.14 – Simulation sans forçage du scalaire. Evolution de la variance du scalaire résolu (a) et évolution de l'enstrophie du scalaire (b) pour des SGE utilisant les modèles *DEDM* (- - -), *DNTDM* (.....) et *ANNM* (-·-·-) comparés à la *SND* filtrée (—).

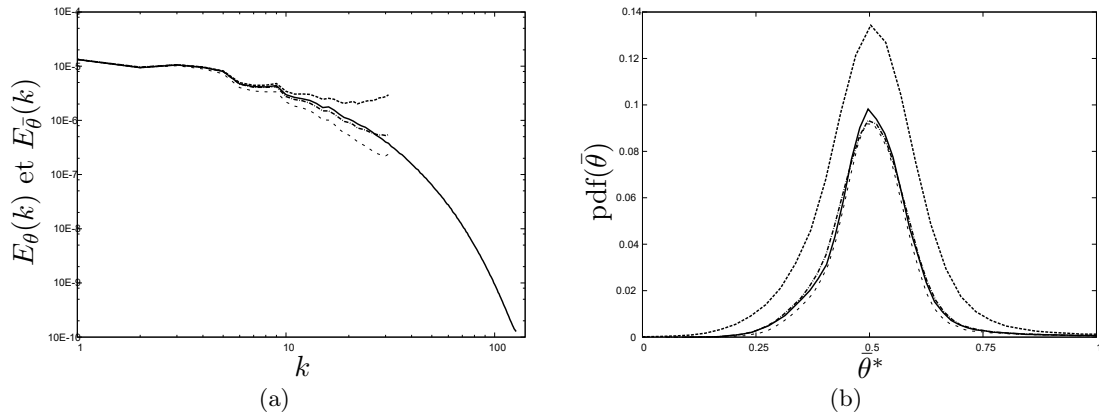


FIGURE 4.15 – Simulation sans forçage du scalaire. Spectres (a) et fonction de densité de probabilité (b) pour le scalaire à $t^* = 0.74$. *DEDM* (- - -), *DNTDM* (.....) et *ANNM* (-·-·-) comparés à la *SND* (a) et *SND* filtrée (b) (—).

Afin de mesurer la capacité d'adaptation du modèle, une nouvelle configuration est considérée, avec la même condition initiale, mais sans forçage du scalaire. Il s'agit donc d'un cas de décroissance de la variance du scalaire.

Les conclusions faites des tests *a posteriori* précédents pour les deux modèles algébriques *DEDM* et *DNTDM* sont conservées pour ce qui concerne les décroissances prédites. Sur la figure 4.14 le modèle *DNTDM* sur-prédit la variance et l'enstrophie du scalaire alors que *DEDM* produit une

sur-dissipation responsable de la sous-prédiction de la variance et de l'enstrophie du scalaire. Le comportement de *ANNM* sur cette simulation montre que l'évolution de la variance du scalaire est proche de l'évolution de la variance du scalaire de la *SND* filtrée (figure 4.14(a)). Cependant, sur la figure 4.14(b), l'enstrophie du scalaire est sur-prédite par *ANNM* tout au long de la décroissance. Les quantités instantanées analysées sur la figure 4.15 ne montrent pas particulièrement de faiblesse pour *ANNM* hormis la légère accumulation d'énergie, sur les spectres de la figure 4.15(a).

Un test supplémentaire est réalisé pour une *SGE* calculée à partir d'un champ scalaire initialisé aléatoirement par la méthode d'Eswaran & Pope [28], donc complètement décorrélié de la base d'apprentissage de *ANNM*. Les comportements des modèles algébriques *DEDM* et *DNTDM* pour cette nouvelle configuration est analogue à ceux observés pour les deux configurations présentés comme on peut l'observer sur les figures 4.16 et 4.17. Par contre, on constate ici les limites du modèle *ANNM* avec la sur-prédiction de toutes les quantités (figure 4.16) et une forte accumulation aux plus petites échelles résolues des spectres d'énergie de scalaire (figure 4.17(a)) et des fonctions de densité de probabilité des valeurs de scalaire (figure 4.17(b)).

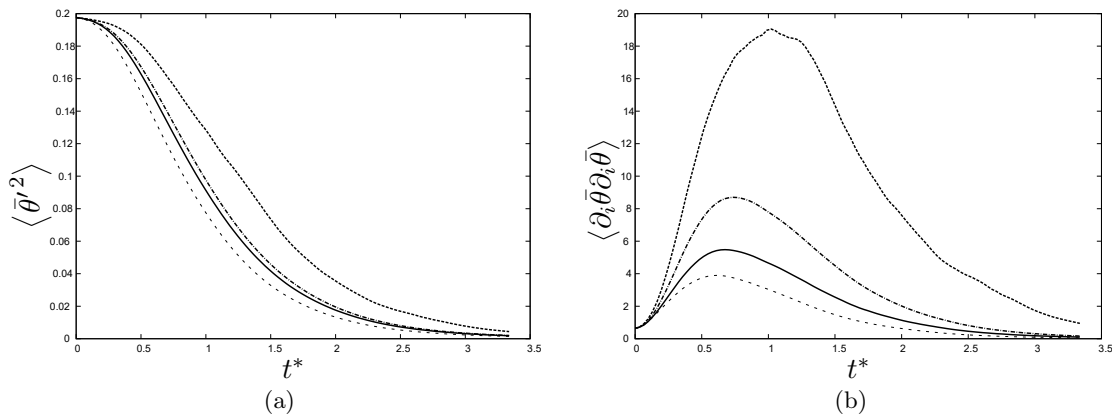


FIGURE 4.16 – Simulation depuis un scalaire initialisé aléatoirement. Evolution de la variance du scalaire résolu (a) et évolution de l'enstrophie du scalaire (b), des *SGE* ayant pour modèle *DEDM* (---), *DNTDM* (.....) et *ANNM* (----) comparés à la *SND* filtrée (—).

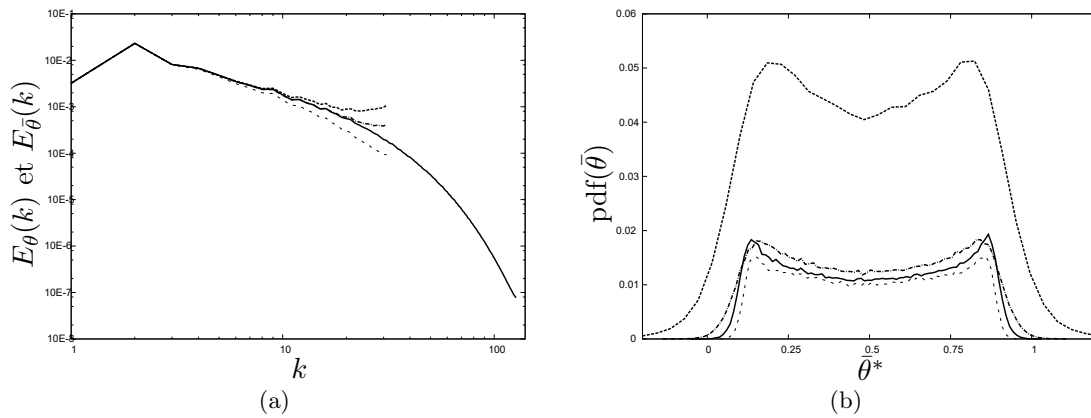


FIGURE 4.17 – Simulation depuis un scalaire initialisé aléatoirement. Spectres (a) et fonction de densité de probabilité (b) pour le scalaire à $t^* = 0.74$. *DEDM* (---), *DNTDM* (.....) et *ANNM* (----) comparés à la *SND* (a) et *SND* filtrée (b) (—).

4.6 Conclusions

Nous avons montré dans ce chapitre que la technique de l'estimateur optimal utilisée comme modèle sous-maille pouvait être reliée à la théorie de la SGE optimale de Langford & Moser pour une formulation locale des variables de conditionnement.

L'application de la technique de l'estimateur optimal avec des variables issues de modèles sous-maille courants, a prouvé la validité du concept. La qualité de prédiction du modèle exploitant l'EO dépendant de son jeu de variables de conditionnement, nous avons utilisé la décomposition complète et irréductible des fonctions vectorielles de Noll afin de définir un jeu de variables à l'erreur irréductible faible.

Nous avons intégré ce jeu de variables en entrée d'un réseau de neurones perceptron multi-couches pour construire un nouveau modèle, noté *ANNM*, permettant de se substituer à l'estimateur optimal. Cette construction s'effectue par le biais d'un entraînement ayant pour rôle d'optimiser les paramètres du réseau de neurones dans le but de minimiser l'erreur quadratique du futur modèle.

Les tests *a priori* de ce modèle *ANNM* montrent ses bonnes performances structurelles, qui confirment son bon apprentissage, et ils révèlent en outre de bonnes aptitudes fonctionnelles. Le phénomène d'amélioration fonctionnelle, suite à l'amélioration structurelle, a également été observé lors des tests réalisés sur les estimateurs optimaux *EO-CM* et *EO-DEDM*. La performance structurelle est une erreur locale sur un terme entrant en ligne de compte dans le calcul de la performance fonctionnelle. Il est donc compréhensible que l'amélioration de la performance structurelle puisse également améliorer la performance fonctionnelle du modèle.

Les tests *a posteriori* de *ANNM* montrent que ce modèle est très bien adapté pour des écoulements présentant de fortes similarités avec la base de données ayant servi à le construire. Par contre, nous avons observé que la simulation du même écoulement avec une initialisation très différente suffisait à mettre *ANNM* en défaut sur la prédiction des grandeurs importantes du scalaire résolu.

Nous en concluons que si le jeu de variables $\{\phi\}^{ANNM}$ est pertinent en tant que variables d'entrées d'un modèle sous-maille pour le scalaire passif, la forme fonctionnelle du modèle doit être adaptée en fonction de l'écoulement à traiter pour obtenir de bonnes prédictions sur les statistiques des grandeurs caractérisant l'écoulement. Cette adaptation de la forme fonctionnelle signifie un nouvel entraînement du réseau perceptron multi-couches avec son jeu de variables normalisées.

Le dernier chapitre est consacré à l'utilisation de réseaux de neurones en tant que procédure de calcul de coefficients dynamiques pour des modèles sous-maille basés sur des décompositions vectorielle et tensorielle telles que celle de Noll [67]. En fixant ainsi la forme du modèle et en utilisant les réseaux de neurones uniquement pour déterminer les coefficients, une plus grande universalité du modèle est espérée.

Chapitre 5

Coefficients adaptatifs déduits de réseaux de neurones à apprentissage multiobjectifs

Sommaire

5.1 Coefficients adaptatifs pour le modèle de Wang <i>et al.</i>	90
5.1.1 Réseau de neurones à apprentissage supervisé avec critères multiobjectifs . . .	92
5.1.2 Optimisation et résultats <i>a priori</i>	95
5.1.3 Tests <i>a posteriori</i> et extension à d'autres écoulements	100
5.1.4 Conclusion	107
5.2 Coefficients adaptatifs pour le modèle de Lund & Novikov	108
5.2.1 Résultats de l'optimisation	109
5.2.2 Tests <i>a priori</i>	111
5.2.3 Tests <i>a posteriori</i>	112
5.3 Conclusion	115

Le chapitre précédent a été consacré à l'utilisation de l'estimateur optimal directement comme modèle sous-maille ($EO-CM$ et $EO-DEDM$) (voir section 4.2 du chapitre 4) et à la construction d'un modèle se substituant à l'estimateur optimal avec la technique d'apprentissage supervisé des réseaux de neurones de type perceptron multi-couches ($ANNM$) (voir section 4.4 du chapitre 4). Un des problèmes soulevé pour réaliser des modèles sous-maille à partir de l'estimateur optimal est de définir un jeu de variables bien adapté. La décomposition de Noll [67] appliquée au vecteur sous-maille du scalaire passif fournit une expression algébrique complète et irréductible [102]. C'est de cette expression qu'a été tiré un jeu de variables performant pour calculer l'estimateur optimal dont le modèle $ANNM$ constitue une approximation ou modèle substitut.

Le présent chapitre est motivé par deux constatations : dans la partie 4.5.1 du chapitre précédent, la performance de la procédure dynamique du $DNTDM$ de Wang *et al.* [96] a été remise en question car elle semblait être à l'origine de la large différence entre l'erreur quadratique du $DNTDM$ et l'erreur irréductible de son jeu de variables de conditionnement (figure 4.9(a)). Par ailleurs, les conclusions du chapitre précédent montrent que la formulation d' $ANNM$ basée exclusivement sur l'apprentissage supervisé n'autorise pas l'universalité d'un modèle algébrique, puisque les capacités de $ANNM$ à simuler des configurations d'écoulements variées sont limitées.

Les inconvénients relevés sur ces deux modèles nous conduisent à remettre en perspective dans ce dernier chapitre l'utilisation de la décomposition de Noll [67] et des réseaux de neurones dans le contexte de la modélisation sous-maille.

Nous proposons ainsi d'exploiter l'expression algébrique obtenue avec la décomposition de Noll [67] en repartant de l'expression du modèle $DNTDM$ et en construisant une nouvelle procédure dynamique à l'aide de réseaux de neurones.

Cette nouvelle procédure va se baser sur la connaissance *a priori* des coefficients à modéliser et des variables dont ils dépendent. Cette dépendance est en effet explicitée dans la décomposition de Noll [67].

A partir de ces couples variables/coefficients, une fonction de substitution peut être construite avec la technique des réseaux de neurones perceptron multi-couches. L'entraînement de ce réseau a pour particularité d'optimiser ses paramètres en fonction de la minimisation de deux objectifs. Ces deux objectifs sont basés respectivement sur les performances structurelles et fonctionnelles des modèles construits à partir des réseaux de neurones. Cette procédure de construction va permettre d'obtenir un nouveau modèle noté *ACWM* pour "Adaptative Coefficient Wang *et al.* Model". L'expression de ce modèle associe une forme algébrique et un réseau de neurones et par conséquent il sera dit hybride. L'objectif du modèle *ACWM* est double :

- proposer une alternative à la procédure dynamique de calcul des coefficients de Wang *et al.* ,
- construire un modèle en partie issu de techniques d'apprentissage supervisé dont l'universalité sera étendue par rapport à *ANNM*.

Enfin, ce nouveau modèle subira une série de tests *a priori*, puis *a posteriori* pour confirmer la pertinence de la démarche.

Cette méthode de construction de modèle hybride sera également appliquée au tenseur sous-maille de la vitesse τ_{ij} (1.41). Une méthode de décomposition complète et irréductible de tenseur symétrique d'ordre 2, exposée par Zheng [102], est la décomposition tensorielle de Spencer & Rivlin [88]. Cette décomposition a été utilisée par Lund & Novikov [55] afin d'écrire le tenseur sous-maille de la vitesse en fonction des tenseurs \bar{S}_{ij} et $\bar{\Omega}_{ij}$, respectivement les tenseurs des taux de déformations et de rotations filtrés. De façon similaire à la décomposition de Noll [67] pour le vecteur sous-maille du scalaire passif, les monômes nécessitent le calcul de coefficients qui dépendent de variables explicitées dans la décomposition tensorielle. Une procédure de construction semblable au modèle *ACWM* est mise en place dans la section 5.2 pour construire une fonction de substitution calculant les coefficients de ce modèle. Ce modèle hybride pour le tenseur sous-maille de la vitesse sera noté *ACLNM* pour "Adaptative Coefficient Lund & Novikov Model". L'extension de la procédure de calcul des coefficients adaptatifs pour ce modèle vise à montrer la généralisation possible de la procédure initialement appliquée au scalaire pour obtenir *ACWM*. Des tests *a priori* du modèle *ACLNM* puis quelques tests *a posteriori* seront effectués pour valider la procédure proposée.

5.1 Coefficients adaptatifs pour le modèle de Wang *et al.*

Dans cette partie, nous allons donc nous intéresser à la construction d'un modèle hybride pour le vecteur sous-maille du scalaire passif. Ce modèle va fusionner une expression algébrique et un réseau de neurones en s'appuyant sur la décomposition vectorielle de Noll [67]. Cette décomposition appliquée au vecteur sous-maille du scalaire passif nous donne l'expression (4.20) obtenue au chapitre 4 précédent, et qui est rappelée ici :

$$\tau_i = f_1 v_i + f_2 M_{ij} v_j + f_3 M_{ik} M_{kj} v_j, \quad (5.1)$$

où les f_i sont trois fonctions scalaires qui dépendent des invariants :

$$I_M = M_{ii}, \quad II_M = M_{ik} M_{ki}, \quad III_M = M_{ik} M_{kl} M_{li}, \quad (5.2)$$

$$I_v = v_i v_i, \quad I_{Mv} = v_i M_{ik} v_k, \quad II_{Mv} = v_i M_{ik} M_{kj} v_j. \quad (5.3)$$

Dans le chapitre précédent, cette décomposition a permis de générer un jeu de variables performant afin de construire un estimateur optimal de la divergence du vecteur sous-maille pour le scalaire passif. Ici, l'expression (5.1) va être utilisée directement en tant que modèle algébrique pour modéliser les composantes du vecteur sous-maille. Le choix des expressions de v_i et de la matrice symétrique M_{ij} suit les précédents travaux de Wang *et al.* [96], confirmé par l'analyse faite à la section 4.3. Ainsi :

$$v_i = \bar{\Delta}^2 |S| \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i} \quad \text{et} \quad M_{ij} = \frac{\bar{S}_{ij}}{|\bar{S}|}. \quad (5.4)$$

Les coefficients f_i conservent la formulation générale donnée par Noll [67] et plus aucune hypothèse simplificatrice, telle que l'uniformité spatiale¹, n'est émise. Il est uniquement stipulé que f_i ne dépend que des 6 invariants :

$$f_i(I_M, II_M, III_M, I_v, I_{Mv}, II_{Mv}). \quad (5.5)$$

Deux différences majeures émergent par rapport à la méthode de calcul des coefficients dynamiques du *DNTDM* de Wang *et al.* rappelée dans le chapitre 4.5 :

1. la variation spatiale des coefficients. Même si la méthode de calcul des coefficients dynamiques du *DNTDM* de Wang *et al.* a été conçue pour calculer des triplets de coefficients en chaque point de la grille de discrétisation, son implémentation (4.39) a nécessité l'adjonction d'un limiteur rendant le calcul des triplets spatialement homogène à chaque pas de temps (4.5).
2. la dépendance aux invariants tensoriels à la plus petite échelle résolue de la SGE. Considérer les coefficients dépendants des invariants de M_{ij} et v_i (5.4) les distinguent des coefficients dynamiques usuels² car ils dépendent de quantités qui ne sont pas filtrées à l'échelle du filtre test. Par conséquent, cette méthode s'écarte de l'hypothèse de similarité d'échelle et sera donc notée *AC* pour "Adaptative Coefficient" afin de la différencier des procédures habituelles.

Enfin, comme évoqué dans le chapitre précédent, section 4.5.1, la méthode de calcul des coefficients de Wang *et al.* [96] implémentée suivant la description (4.39), est supposée être à l'origine des mauvaises performances du *DNTDM*. Donc cette nouvelle procédure adaptative de calcul des coefficients est un point clef dans l'exploitation du potentiel d'amélioration du modèle de Wang *et al.* [96]. La marge de progression en performance structurelle du *DNTDM* a été mise en évidence sur la figure 4.9(a) et la réduction de l'écart considérable entre erreur quadratique et erreur irréductible normalisée de *DNTDM* est un enjeu de la démarche proposée ici.

Compte-tenu des variables M_{ij} et v_i choisies, les deux invariants I_M, II_M sont constants en espace et en temps, ce qui réduit le nombre de variables à 4 dans l'expression (5.5). A ce stade, le modèle de sous-maille a donc pour expression :

$$f_i(III_M, I_v, I_{Mv}, II_{Mv})$$

$$\tau_i = f_1 \bar{\Delta}^2 |S| \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i} + f_2 \bar{\Delta}^2 \bar{S}_{ij} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_j} + f_3 \bar{\Delta}^2 \frac{\bar{S}_{ij} \bar{S}_{jk}}{|S|} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_k} \quad (5.6)$$

Une fonction de substitution va permettre de construire les f_i nécessaires pour établir la relation entre les invariants tensoriels et les coefficients. Un réseau de neurones multi-couches de type perceptron est donc utilisé pour construire une fonction vectorielle regroupant les trois fonctions scalaires f_i . En reprenant les notations de la partie 4.4.1 du chapitre précédent, le réseau de neurones que nous avons choisi d'entraîner s'écrit :

$$\{I, O, m^1, m^2\} = \{4, 3, 8, 5\}, \quad (5.7)$$

caractérisant ainsi la topologie du réseau en référence à la figure 4.7. Ce réseau est donc constitué de 4 variables d'entrées, de 3 sorties et de 2 couches de neurones cachés ayant chacune 8 et 5 neurones³. Par conséquent, en appliquant les notations relatives à ce réseau et en remplaçant M_{ij} et v_i par leurs expressions, le modèle complet que nous cherchons à construire s'écrit,

$$\tau_i^{ACWM} = g_1|_{\mathbf{p}}(\phi) \bar{\Delta}^2 |S| \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i} + g_2|_{\mathbf{p}}(\phi) \bar{\Delta}^2 \bar{S}_{ij} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_j} + g_3|_{\mathbf{p}}(\phi) \bar{\Delta}^2 \frac{\bar{S}_{ij} \bar{S}_{jk}}{|S|} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_k}, \quad (5.8)$$

1. Hypothèse faite pour constituer le jeu de variables du modèle *ANNM* dans le paragraphe (4.3.1)

2. Comme ceux déjà évoqués dans le manuscrit aux sections 4.2, 3.1.3 et dans l'annexe A respectivement proposés par Germano *et al.* [33], Lilly [51], Fabre & Balarac [29] et You & Moin [98]

3. Cette topologie de réseau n'a pas fait l'objet d'une campagne de test car la technique d'entraînement mise en place 5.1.1 a nécessité une grande quantité de ressources de calcul.

où $\phi = (III_M, I_v, I_{Mv}, II_{Mv})$ est le vecteur des variables d'entrées du réseau de neurones, les g_i sont les composantes de la sortie vectorielle du réseau de neurones et

$$\mathbf{p} = \{\omega_{ij}^q, \beta_i^q\} \quad (5.9)$$

est l'ensemble de ses paramètres qui seront à fixer au cours de la phase d'apprentissage.

La définition du modèle (5.8) combine une formulation algébrique et un réseau de neurones. Par cette construction hybride, le modèle devrait tirer parti des avantages de chacune des formulations :

- l'universalité d'un modèle algébrique,
- la performance structurelle des modèles exclusivement basés sur des réseaux de neurones *ANNM*.

La forme algébrique du nouveau modèle (5.8) étant maintenant figée, nous nous tournons vers la méthode utilisée pour fixer les paramètres du réseau de neurones (5.7).

5.1.1 Réseau de neurones à apprentissage supervisé avec critères multiobjectifs

Cette partie est dédiée à l'explication de la méthode employée pour calculer l'ensemble des paramètres \mathbf{p} (5.9) du réseau de neurones perceptron multi-couches (5.7). A l'issue de cet apprentissage, ce réseau de neurones constituera la méthode de calcul *AC* (Adaptative Coefficients) du modèle τ_i^{ACWM} défini par l'expression (5.8).

La procédure permettant l'apprentissage de ce réseau de neurones repose sur le calcul *a priori* des quantités issues de la SGE. Dans l'expression du modèle *ACWM* (5.8), les valeurs numériques :

- des composantes du vecteur sous-maille exact τ_i^{SND} ,
- des monômes v_i , $M_{ij}v_j$ et $M_{ij}M_{jk}v_k$,
- et des invariants tensoriels $III_M, I_v, I_{Mv}, II_{Mv}$,

sont accessibles *a priori* grâce au filtrage explicite d'une base de données de SND. Il est alors possible de calculer les valeurs exactes des triplets de coefficients g_i^{exact} en tous points de l'espace⁴. Le calcul des g_i^{exact} de l'expression (5.8) et des invariants tensoriels à une taille de filtre fixée constituent des listes de stimuli pour effectuer l'apprentissage du réseau de neurones. Dans ce cas, l'apprentissage aurait pour objectif la minimisation de l'erreur

$$E = (g_i^{exact}(\phi) - g_i|_{\mathbf{p}}(\phi))^2 \quad (5.10)$$

en ajustant l'ensemble des paramètres \mathbf{p} . Cette méthode utilise la procédure classique d'apprentissage des réseaux de neurones perceptron multi-couches décrite dans la section 4.4.2 du chapitre précédent. Cependant, la minimisation de cette erreur d'apprentissage ne pilote pas la physique du modèle final τ_i^{ACWM} car elle n'est pas la mesure de sa performance structurelle comme c'était le cas lors de l'apprentissage de l'*ANNM*. Ainsi, il est possible de se trouver dans le cas où le réseau de neurones serait satisfaisant, *i.e.* tel que son erreur quadratique normalisée soit inférieure à 1 par exemple, mais la distribution de son erreur produirait une erreur quadratique du modèle τ_i^{ACWM} :

$$\epsilon_q = \left\langle (\partial_i \tau_i^{SND} - \partial_i \tau_i^{ACWM})^2 \right\rangle, \quad (5.11)$$

qui serait inappropriée dans le contexte de la recherche de la meilleure performance structurelle. Il faut donc adapter la stratégie d'apprentissage pour tenir directement compte de ce critère. Pour chaque taille de filtre, $\bar{\Delta}/\Delta$, la prise en compte de la performance structurelle s'effectue avec le calcul de l'erreur quadratique et constitue le premier critère c_1 :

$$c_1(\bar{\Delta}/\Delta, \mathbf{p}) = \frac{\left\langle (\partial_i \tau_i^{SND} - \partial_i \tau_i^{ACWM})^2 \right\rangle}{\left\langle \partial_i \tau_i^{SND} \partial_i \tau_i^{SND} \right\rangle - \left\langle \partial_i \tau_i^{SND} \right\rangle \left\langle \partial_i \tau_i^{SND} \right\rangle}. \quad (5.12)$$

Parallèlement à la performance structurelle, il est intéressant d'introduire un critère sur la performance fonctionnelle du modèle sous-maille durant sa phase d'apprentissage. La prise en compte de ce critère va

4. l'existence des solutions de ce système est montrée dans Wang *et al.* [96] et rappelée dans le paragraphe 4.5

indiquer comment le compromis de ces deux performances évolue au regard d'une forme fonctionnelle fixée, *i.e.* d'une topologie de réseau de neurones donnée. Cette performance est mesurée avec le calcul de l'erreur relative entre la dissipation sous-maille exacte de la SND filtrée et la dissipation sous-maille du modèle en cours d'optimisation. Cette erreur constitue le second critère c_2 :

$$c_2(\bar{\Delta}/\Delta, \mathbf{p}) = \left| \frac{\langle \tau_i^{SND} \partial_i \bar{\theta} \rangle - \langle \tau_i^{ACWM} \partial_i \bar{\theta} \rangle}{\langle \tau_i^{SND} \partial_i \bar{\theta} \rangle} \right|. \quad (5.13)$$

Ces deux critères c_1 et c_2 fournissent une mesure des performances du modèle τ_i^{ACWM} à taille de filtre fixée. Pour élargir la validité de l'ACWM, les objectifs finaux de l'optimisation sont calculés avec des longueurs de filtrage $\bar{\Delta}$ situées dans la gamme des échelles de la zone inertielle pour cette base de données. L'optimisation consiste donc à :

$$\boxed{\min_{\mathbf{p}} Obj_1 = \max_{\bar{\Delta}/\Delta} [c_1(\bar{\Delta}/\Delta, \mathbf{p})] \quad \min_{\mathbf{p}} Obj_2 = \max_{\bar{\Delta}/\Delta} [c_2(\bar{\Delta}/\Delta, \mathbf{p})]}. \quad (5.14)$$

En résumé, la nouvelle stratégie d'apprentissage revient à déterminer les paramètres \mathbf{p} qui minimisent les objectifs (5.14) calculés *a priori* sur une base de données suivant les expressions de τ_i^{ACWM} (5.8) et τ_i^{SND} sur une plage de longueurs de coupures $\bar{\Delta}$.

La prise en compte de deux objectifs nécessite d'exploiter la notion de relation de dominance entre les "individus" du processus d'optimisation. Chaque "individu" représente un vecteur de paramètres \mathbf{p} (5.9) généré pour minimiser les objectifs (5.14). Cette relation de dominance intervient lorsque les objectifs à minimiser sont antagonistes, *i.e.* tels que la minimisation de Obj_1 n'implique pas la minimisation de Obj_2 et réciproquement. Un individu noté \mathbf{p}_i domine l'individu \mathbf{p}_j si les objectifs de l'individu \mathbf{p}_i sont tous au moins aussi bons que ceux de l'individu \mathbf{p}_j et qu'il existe au moins un objectif de \mathbf{p}_i strictement meilleur que le même objectif de \mathbf{p}_j [14]. Cette relation de dominance sera notée :

$$\mathbf{p}_i \succeq \mathbf{p}_j. \quad (5.15)$$

Deux individus peuvent ne pas se dominer l'un l'autre. Par exemple, dans le cas du problème (5.14) à $\bar{\Delta}/\Delta$ fixé, si \mathbf{p}_i est tel que $c_1(\mathbf{p}_i) < c_1(\mathbf{p}_j)$ mais que $c_2(\mathbf{p}_i) > c_2(\mathbf{p}_j)$ alors \mathbf{p}_i est meilleur que \mathbf{p}_j pour le premier objectif et inversement pour le deuxième de sorte que \mathbf{p}_i et \mathbf{p}_j ne se dominent pas l'un l'autre.

Au cours de l'optimisation, un ensemble d'individus $\{\mathbf{p}\}_G$ va être généré. Tous ces individus peuvent être classés par la relation de dominance de telle sorte que

$$\{\mathbf{p}\}_G = \{\mathbf{p}\}_1 \cup \dots \cup \{\mathbf{p}\}_i \cup \dots \cup \{\mathbf{p}\}_N \quad \text{avec} \quad \forall \mathbf{p}_q \in \{\mathbf{p}\}_i \text{ et } \forall \mathbf{p}_r \in \{\mathbf{p}\}_{i+1}, \mathbf{p}_q \succeq \mathbf{p}_r. \quad (5.16)$$

Les individus présents dans l'ensemble $\{\mathbf{p}\}_1$ forment le front de Pareto global des individus de l'ensemble $\{\mathbf{p}\}_G$, également appelé front de Pareto de rang 1. Les autres ensembles $\{\mathbf{p}\}_i$ sont les fronts de Pareto de rang i . A l'issue du processus d'optimisation, les individus d'intérêt se trouveront donc dans le front de Pareto de rang 1. Ces individus donneront les compromis réalisables entre les deux critères de performances.

La prise en compte de deux objectifs dans l'apprentissage du réseau de neurones implique de modifier l'entraînement de celui-ci, et donc l'algorithme d'optimisation. L'optimisation des paramètres du réseau de neurones précédemment utilisée (chapitre 4) s'effectuait avec l'algorithme RPROP. Cet algorithme est basé sur une méthode de descente de gradient améliorée [75]. Cette méthode s'applique à la minimisation d'un unique objectif. Appliquer RPROP au problème (5.14) exige alors de construire un unique objectif équivalent Obj_{eq} grâce à la combinaison des objectifs initiaux. La méthode la plus immédiate serait de former la combinaison linéaire des objectifs avec un coefficient de pondération γ tel que :

$$Obj_{eq} = \gamma Obj_1 + (1 - \gamma) Obj_2. \quad (5.17)$$

Dans ce cas, la minimisation de Obj_{eq} en faisant varier γ , peut permettre de décrire le front de Pareto global. En toute rigueur, il n'y a pas nécessairement équivalence entre la résolution de (5.17) avec γ variable et la résolution de (5.14) ; Cette équivalence dépend de la convexité du problème qui n'est pas connue *a priori*. En outre le choix de réglage du coefficient γ peut être délicat à réaliser en pratique. Il nous semble préférable de mettre directement en oeuvre une méthode d'optimisation idéale adaptée à la résolution de (5.14) avec prise en compte simultanée des deux objectifs via la relation de dominance. Plus particulièrement, une méthode de type MOGA pour "Multi Objective Genetic Algorithm", basée sur les algorithmes génétiques, sera utilisée. Cette technique permettra de construire naturellement un front de Pareto global grâce à une répartition discrète des individus sur celui-ci.

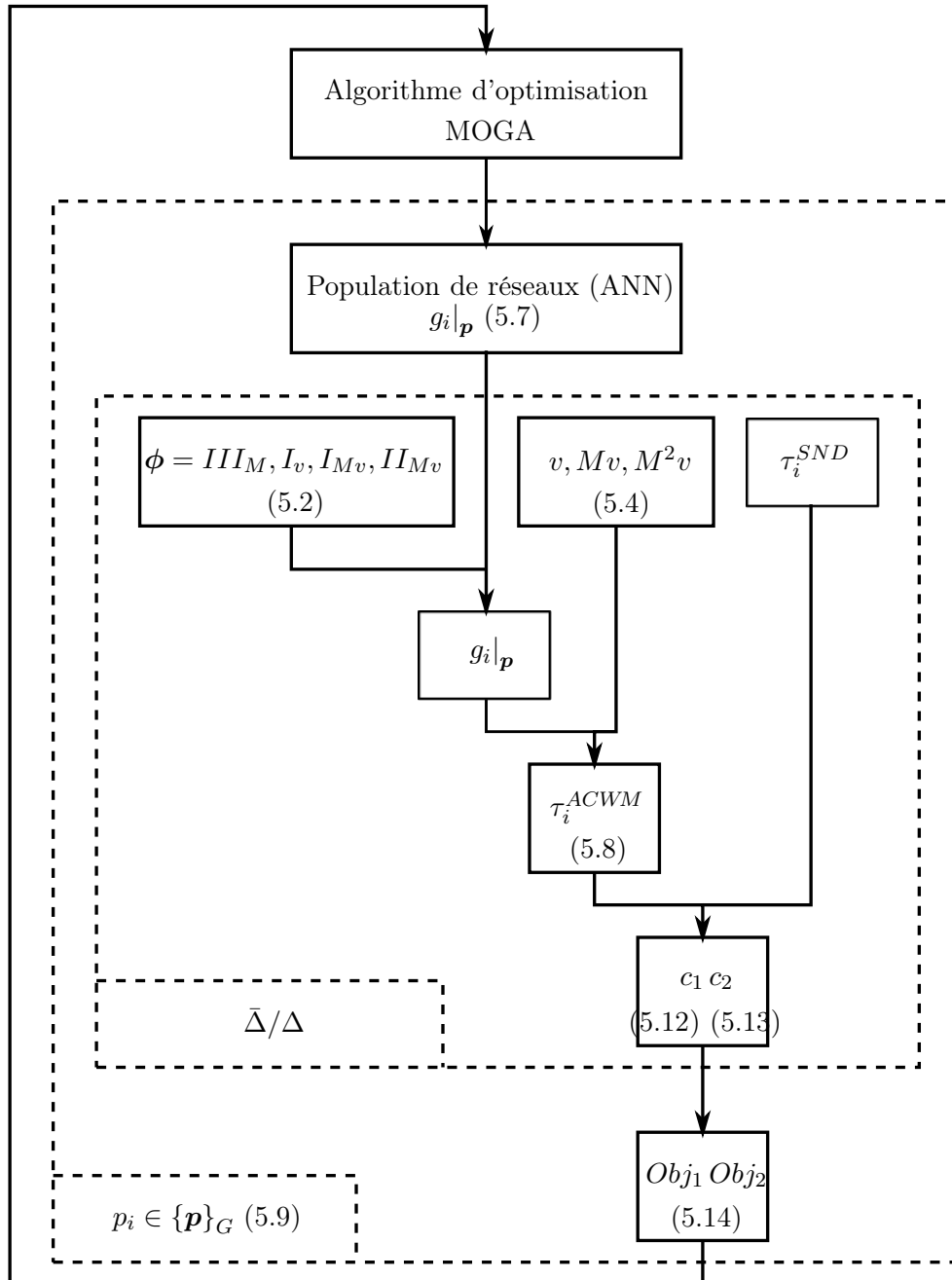


FIGURE 5.1 – Schéma représentatif de la boucle d'optimisation des coefficients adaptatifs du modèle sous-maille ACWM

Les techniques d'optimisation par algorithmes génétiques empruntent en les adaptant de façon simplifiée les concepts et le vocabulaire de la génétique classique [14, 35]. Ces techniques reproduisent l'adaptation d'une population d'individus à son environnement au fil de générations successives en

appliquant 3 opérateurs (sélection, mutation, croisement) pour exploiter et explorer l'espace des solutions. Les règles de transition d'une génération à l'autre sont appliquées avec une certaine probabilité de croisement et de mutation. Le fait de faire évoluer une population de solutions est particulièrement bien adaptée à la résolution d'un problème bi-objectifs tel que (5.14) puisque l'algorithme génétique sera en mesure de répartir la population de solutions le long du front de Pareto global du problème. On trouvera dans [14, 35] des détails sur les principes de fonctionnement des algorithmes génétiques. Pour notre part, nous avons choisi de mettre en oeuvre l'algorithme dit *MOGA* de Fonseca & Fleming [21, 30] qui est une méthode prenant en compte chaque objectif (méthode non-agrégative) et qui se base sur la domination des individus entre eux pour les classer et ainsi faire évoluer la population.

Le problème d'optimisation à résoudre est résumé dans la figure 5.1 où les conditions d'initialisation et de fin de l'algorithme ne sont pas explicitées. L'algorithme d'optimisation MOGA génère une population d'individus et chacun d'eux, \mathbf{p}_i , va suivre les étapes de transformations situées dans le plus grand rectangle en pointillé. Dans un premier temps, chaque \mathbf{p}_i est converti en un réseau de neurones perceptron multi-couches. Pour chaque taille de filtrage $\bar{\Delta}/\Delta$, les quantités émuloées de la SGE sont calculées avec le filtre de coupure spectrale. A partir de ces données, les composantes du vecteur sous-maille exact et du vecteur sous-maille du modèle *ACWM* peuvent être reconstruites *a priori*. Par conséquent, les objectifs Obj_1 et Obj_2 de l'optimisation sont calculables et vont permettre à l'algorithme MOGA de définir la performance des individus de la nouvelle génération en cours. La fonction d'adaptation calculée à partir de Obj_1 et Obj_2 en appliquant le concept de dominance permet à MOGA de sélectionner les meilleurs individus de la génération courante, susceptibles de se reproduire pour former une nouvelle génération d'individus mieux adaptés. Ce processus de reproduction inclut une opération de croisement et une opération de mutation qui sont réalisées au niveau des jeux de paramètres $\{\mathbf{p}\}$ formant la population courante. Croisement et mutation permettent d'explorer l'espace des solutions en produisant de nouveaux jeux de paramètres $\{\mathbf{p}\}$ qui définissent de nouveaux réseaux ANN.

La procédure décrite sur le schéma 5.1 va permettre de converger vers un ensemble de paramètres \mathbf{p} définissant donc un ensemble de fonctions de substitution pour calculer les coefficients adaptatifs du modèle sous-maille τ_i^{ACWM} . Ces fonctions de substitution (de type ANN perceptron multi-couches) offrent un ensemble de compromis entre la performance structurelle (minimisation de Obj_1) et la performance fonctionnelle (minimisation de Obj_2). Nous n'avons pas précisé de critères d'arrêt pour l'algorithme MOGA dont une itération courante est synthétisée sur la figure 5.1. En pratique, l'algorithme évolue jusqu'à ce que la position du front de Pareto dans le plan des objectifs (Obj_1 , Obj_2) ne varie plus de façon significative.

Les résultats analysés dans la section qui suit correspondent donc à une évolution du processus d'optimisation considéré comme convergé.

5.1.2 Optimisation et résultats *a priori*

Tous les termes à émuler et qui sont nécessaires à l'entraînement du réseau de neurones sont calculés *a priori* sur une base de données de SND. Cette base de données est similaire à celle utilisée pour entraîner le réseau de l'*ANNM*, soit un champ de vitesse de THI statistiquement stationnaire à un niveau de turbulence basé sur la micro-échelle de Taylor de $Re_\lambda = 90$ et calculé sur une grille de 256^3 points. Le champ du scalaire passif est également statistiquement stationnaire et son nombre de Schmidt moléculaire est de $Sc = 0.7$. Les quantités de SGE seront émuloées avec un filtre de type spectral, aux longueurs de coupures $\bar{\Delta}/\Delta = \{4, 8, 12, 16\}$. Les invariants $III_M, I_v, I_{Mv}, II_{Mv}$ sont normalisés par le changement de variable (4.35).

La topologie du réseau de neurones (5.7) nécessite 103 paramètres pour être complètement fixée. L'optimisation est réglée pour générer au maximum 10^6 individus dont chaque paramètre varie dans un intervalle de valeurs comprises entre $[-3 : 3]$.

Les figures 5.2 représentent les 10^6 individus de l'optimisation répartis sur 1304 générations. La figure 5.2(a) montre le plan complet des objectifs des 10^6 individus et la figure 5.2(b) présente un agrandissement de la zone du plan des objectifs contenant le front de Pareto global $\{\mathbf{p}\}^{train}$. Les niveaux de

gris de ces deux figures indiquent la position des fronts de Pareto de rang supérieur à 1.

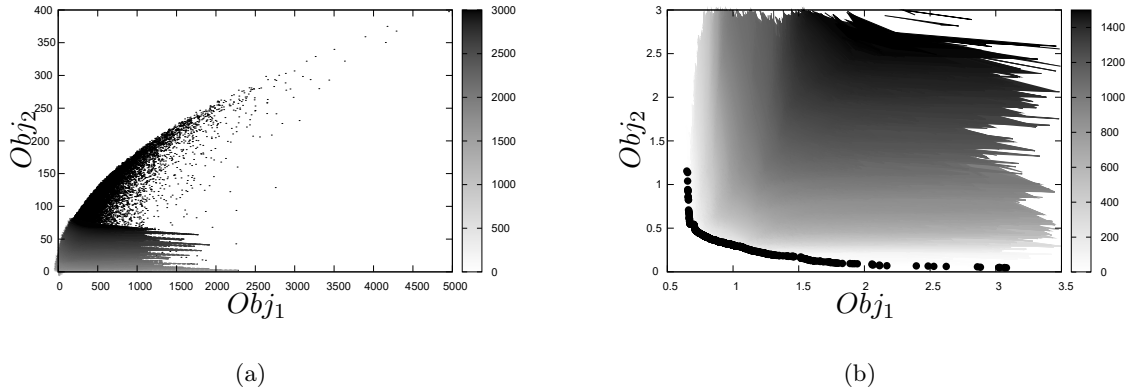


FIGURE 5.2 – (a) représentation complète des individus de l’optimisation des coefficients adaptatifs du modèle *ACWM*. (b) zoom sur les individus du front de Pareto global $\{\mathbf{p}\}^{train}$ ($\bullet \bullet$). Les niveaux de gris représentent l’ordre des fronts de Pareto.

Les individus sont classés dans les fronts de Pareto jusqu’au rang 3000, ce qui représente 87.8% de la population totale $\{\mathbf{p}\}_G$. Le front de Pareto global présente des individus ayant une erreur quadratique maximale assez faible (inférieure à 0.75) ce qui semble être satisfaisant par rapport aux valeurs d’erreurs quadratiques des modèles dans les précédents chapitres. Il existe également des individus performants sur l’objectif Obj_2 , cependant leurs performances sur Obj_1 les rendent *a priori* moins intéressants.

Ces résultats sur le front de Pareto global montrent qu’une contrainte sur les valeurs de Obj_1 aurait pu être ajoutée pour éviter de sélectionner des individus générant des modèles avec une erreur quadratique supérieure à 1. Ils montrent également que les objectifs Obj_1 et Obj_2 sont bien antagonistes, ce qui explique l’existence de la surface de compromis représentée par le front de Pareto global sur la figure 5.2(b). Dans la suite, nous ne considérerons plus que les individus du front de Pareto global qui représente un ensemble de 230 individus de paramètres \mathbf{p} .

Les tests *a priori* des modèles générés par ces individus optimaux au sens de Pareto sont effectués sur la base de données utilisée pour l’entraînement des réseaux de neurones. Les erreurs quadratiques normalisées et les dissipations sous-maille des modèles *ACWM* sont représentées sur les figures 5.3. Les erreurs quadratiques normalisées des modèles sous-maille générés par les individus du front de Pareto global de la figure 5.3(a) montrent des monotonies décroissantes en fonction de la taille de filtre. Compte tenu de la définition de Obj_1 , équation (5.14), cela indique que la valeur de cet objectif pour un individu est la valeur de l’erreur quadratique normalisée de son modèle *ACWM* calculée pour la plus petite taille de filtre soit ici $\bar{\Delta}/\Delta = 4$. La représentation de ces erreurs forme un faisceau de courbes parallèles entre elles.

L’évolution de la forme des dissipations sous-maille (figure 5.3(b)) des modèles *ACWM* est corrélée avec la variation des valeurs des objectifs Obj_2 des individus. L’individu le plus performant sur cet objectif produit le modèle *ACWM* ayant la dissipation sous-maille la plus proche de la SND filtrée comme attendu. L’augmentation de la valeur de l’objectif Obj_2 se traduit d’abord par une augmentation de la dissipation (diminution de $-\langle \bar{\theta} \partial_i \tau_i \rangle$) prédite pour les plus petites tailles de filtre et une diminution de cette dissipation (augmentation de $-\langle \bar{\theta} \partial_i \tau_i \rangle$) pour les plus grandes tailles de filtre. Puis, les individus ayant les valeurs les plus importantes pour Obj_2 , produisent des modèles de plus en plus dissipatifs pour toutes les tailles de filtre. Cette augmentation de la dissipation sous-maille tend à être supérieure à celle du *DEDM* pour les petites tailles de filtre.

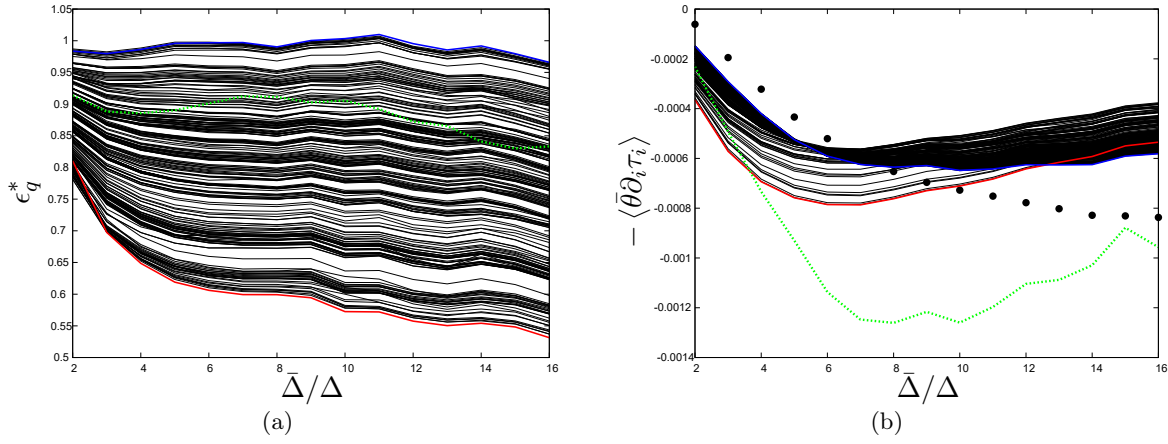


FIGURE 5.3 – Test *a priori* des modèles *ACWM* construits avec les individus du front de Pareto global. (a) : évolution de l’erreur quadratique normalisée. (b) : évolution de la dissipation sous-maille des modèles *ACWM* (—), *DEDM* (---) et de la *SND* filtrée (• •) en fonction de la taille de filtre $\bar{\Delta}/\Delta$.

Ces tests *a priori* montrent qu’une grande part des individus du front de Pareto global produisent des modèles ayant de meilleures performances structurelles que *DEDM*. De plus, les valeurs d’objectifs Obj_1 classent les individus dans le même ordre que les erreurs quadratiques normalisées de leurs modèles. Puisque le calcul de l’objectif Obj_2 est la minimisation des maximums des écarts relatifs entre la dissipation sous-maille des modèles et la dissipation sous-maille exacte. Cela revient à contraindre la représentation graphique de la dissipation sous-maille du modèle à rester dans une enveloppe de valeurs dont les bornes sont équiréparties autour de la dissipation sous-maille exacte. Cette façon de quantifier la performance fonctionnelle ne permet pas de tenir compte de la sur-dissipation ou de la sous-dissipation générale du modèle. Ainsi, les résultats des tests *a priori* confirment qu’il n’y a pas de bijection entre la valeur de l’objectif Obj_2 et les performances fonctionnelles des modèles. Le meilleur individu sur l’objectif Obj_2 produit en effet un modèle relativement proche de la dissipation sous-maille exacte mais il est sous-dissipatif à partir de $\bar{\Delta}/\Delta = 6$ et à l’opposé, le moins bon individu sur cet objectif produit un modèle sur-dissipatif et qui s’éloigne de la forme de la dissipation sous-maille exacte tout en assurant un modèle stable. Enfin, ces résultats *a priori* confirment que la topologie choisie pour le réseau de neurones n’offre pas un degré de liberté suffisant pour produire des modèles ayant simultanément de bonnes performances structurelles et fonctionnelles. Cette limite est illustrée sur la figure 5.3 avec le marquage en bleu (—) des performances du modèle généré par le meilleur individu pour l’objectif Obj_2 et en rouge (—) pour le modèle généré par le meilleur individu sur l’objectif Obj_1 . C’est à cause de cette limite qu’il existe une surface de compromis légitimant l’optimisation multiobjectifs. L’individu optimal au sens de l’erreur quadratique produit une performance fonctionnelle inférieure à celle d’un individu optimal pour ce critère mais qui inversement, produit une erreur quadratique importante. La première passe d’optimisation effectuée a permis de dégager un ensemble de Pareto constitué de 230 individus donc 230 modèles substitués ANN possibles. Pour effectuer un tri parmi cet ensemble de solutions non-dominées, nous adoptons les critères suivants (non inclus dans la définition initiale du problème d’optimisation) :

- les solutions de l’ensemble global de Pareto conduisant à des performances structurelles inférieures à celle du modèle *DEDM* sont écartées.
- on souhaite également écarter des individus trop spécialisés par rapport à la base de données utilisée initialement.

La réalisation pratique du premier critère est très simple à réaliser puisqu’il s’agit d’introduire une contrainte sur les performances structurelles. Le second critère est réalisé en faisant appel à une base de données supplémentaires pour évaluer les performances des modèles substitués ANN.

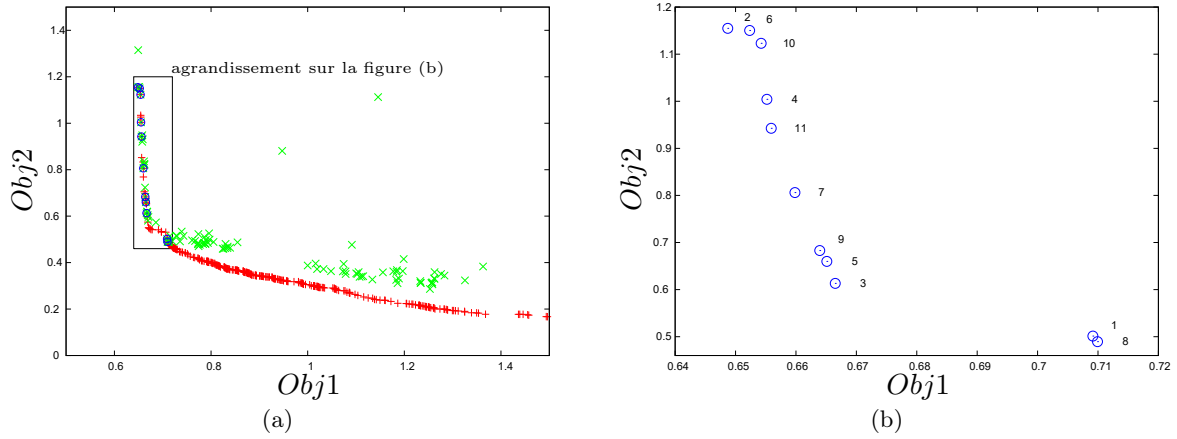


FIGURE 5.4 – (a) Représentation des individus des fronts de Pareto globaux pour la base de données d’entraînement $\{\mathbf{p}\}^{train}$ (+) et pour la base de données de test $\{\mathbf{p}\}^{test}$ (x) dans le plan des objectifs calculé sur la base de données d’entraînement. Les symboles (o) représentent les individus de l’intersection des deux ensembles. (b) : Agrandissement de la zone du plan des objectifs où se trouve les individus formant l’intersection des deux fronts de Pareto (o).

Cette nouvelle base de données a été calculée à partir de la base de données d’entraînement. Les champs de vitesse et de scalaire ont été forcés pendant 7 temps de retournement tourbillonnaire supplémentaires ce qui rend cette base de données statistiquement identique à celle utilisée pour l’entraînement. Cependant, les champs de vitesse et de scalaire sont décorrélés.

Les objectifs Obj_1 et Obj_2 des 10^6 individus sont à nouveau calculés sur cette deuxième base de données sans réaliser une nouvelle optimisation. Un deuxième front de Pareto global $\{\mathbf{p}\}^{test}$ est construit en utilisant ces valeurs de (Obj_1, Obj_2) . Désormais, le front de Pareto de la base de données d’entraînement $\{\mathbf{p}\}_G$ sera noté $\{\mathbf{p}\}^{train}$.

L’intersection des individus du front de Pareto $\{\mathbf{p}\}^{train}$ et $\{\mathbf{p}\}^{test}$ est construite afin d’extraire les individus dominants sur les deux bases de données s’il en existe. La figure 5.4 montre la superposition du front de Pareto $\{\mathbf{p}\}^{train}$ avec les objectifs des individus du front de Pareto $\{\mathbf{p}\}^{test}$ calculés sur la base de données d’entraînement. L’ensemble des individus tels que

$$\{\mathbf{p}\}^{inter} = \{\mathbf{p}\}^{train} \cap \{\mathbf{p}\}^{test} \quad (5.18)$$

est effectivement non vide et a un cardinal de 11. La figure 5.4(a) montre que les individus de $\{\mathbf{p}\}^{inter}$ privilégient la minimisation de Obj_1 par rapport à celle de Obj_2 . Sur la figure 5.4(b) les individus de $\{\mathbf{p}\}^{inter}$ ont été isolés dans le plan des objectifs puis numérotés afin de les distinguer dans la suite des tests. Les valeurs objectifs de ces individus s’étendent sur une plage de 10% (resp. 140%) pour l’objectif Obj_1 (resp. Obj_2) relativement à la plus petite valeur atteinte. Les individus dominants sur les deux bases de données sont donc ceux ayant les meilleures performances structurelles.

Nous concentrons maintenant notre analyse sur les seuls individus de l’ensemble $\{\mathbf{p}\}^{inter}$. Différents tests *a priori* et *a posteriori* vont nous permettre d’évaluer le comportement de ces modèles sous-maille dont les caractéristiques sont d’avoir une faible erreur quadratique (associé à la minimisation de Obj_1) et donc une forte valeur d’objectif Obj_2 sur la base de données d’entraînement (puisque nous avons observé que Obj_1 et Obj_2 étaient des objectifs antagonistes).

Avant de mener ces tests, les paramètres des individus de l’ensemble $\{\mathbf{p}\}^{inter}$ sont visualisés sur la Figure 5.5. Comme la dimension du vecteur des paramètres est de 103, il n’est pas raisonnable de les tracer directement dans le plan des objectifs. La représentation utilisée montre, dans la zone noircie, les valeurs des composantes des 11 vecteurs paramètres en fonction de la position de la composante. Certaines composantes (42^{ème}, 62^{ème} ...) ont une grande amplitude, relativement aux bornes imposées

aux composantes des vecteurs paramètres de l'optimisation. Cela montre que l'ensemble des individus $\{\mathbf{p}\}^{inter}$ est formé par des vecteurs relativement éloignés les uns des autres dans l'espace des paramètres. Ce constat visuel est confirmé par le calcul de la norme L_2 séparant ces vecteurs. La plus grande distance de l'hypervolume selon cette norme vaut $6\sqrt{103}$. On peut calculer la distance normalisée par la valeur maximale séparant deux vecteurs de l'ensemble $\{\mathbf{p}\}^{inter}$ par la relation :

$$\frac{\|p_k - p_l\|_{L_2}}{6\sqrt{103}} \quad \text{avec } k \neq l \quad \text{et } p_l \in \{\mathbf{p}\}^{inter}. \quad (5.19)$$

Les valeurs extrêmes sont de 3.4% et 34% ce qui montre que les 11 individus de l'ensemble $\{\mathbf{p}\}^{inter}$ ne sont pas regroupés dans un unique foyer de solution de cette distance normalisée.

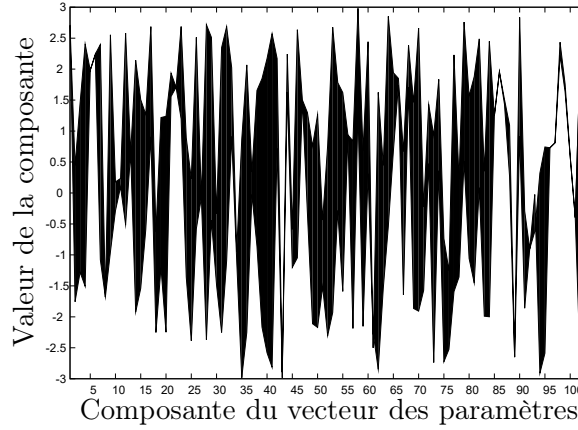


FIGURE 5.5 – Valeurs des composantes des vecteurs des 11 individus de l'ensemble $\{\mathbf{p}\}^{inter}$ formant l'intersection des deux fronts de Pareto 5.4(b)

Les individus de l'ensemble $\{\mathbf{p}\}^{inter}$ sont maintenant notés \mathbf{p}_i^{inter} et leurs modèles respectifs $ACWM_i$ avec i le numéro de l'individu⁵ (5.4(b)). Les tests *a priori* des modèles sous-maille $ACWM_i$ sont présentés en détail sur les figures 5.6(a) et 5.6(b). Ces différents modèles $ACWM_i$ comparés au modèle $DEDM$ qui constitue la référence et au modèle $ANNM$ qui a été construit sur la même base de données que la base de données conduisant à $\{\mathbf{p}^{train}\}$.

Les mesures des performances structurelles des modèles sous-maille sont représentées sur la figure 5.6(a). Malgré la prédisposition des individus \mathbf{p}_i^{inter} à privilégier la performance structurelle des $ACWM_i$, le modèle $ANNM$ reste plus performant sur le plan structurel car il repose uniquement sur un réseau de neurones lui autorisant donc un plus grand nombre de degrés de liberté. De plus, l'apprentissage de $ANNM$ produit directement un modèle structurel sans compromis avec la performance fonctionnelle. Notons que les modèles $ACWM_i$ sont tous plus performants structurellement que le $DEDM$.

Les performances fonctionnelles des modèles sous-maille $ACWM_i$ sont représentées sur la figure 5.6(b). Les individus \mathbf{p}_i^{inter} sont les moins performants de l'ensemble $\{\mathbf{p}\}^{train}$ sur l'objectif Obj_2 (figure 5.4(b)), cependant les modèles $ACWM_i$ associés sont *a priori* stables grâce à leur sur-dissipation dans la gamme des échelles de filtrage $\bar{\Delta}/\Delta = [2; 10]$. En comparaison avec $ANNM$, les modèles $ACWM_i$ ont donc un comportement favorisant la stabilité sur une plus large gamme de filtrage. De plus, ils ne produisent pas un fort transfert inverse comme $ANNM$ peut le faire pour $\bar{\Delta}/\Delta = 2$. Notons à nouveau que les modèles $ACWM_i$ sont tous moins sur-dissipatifs que le $DEDM$, à partir de $\bar{\Delta}/\Delta = 4$.

L'effet du filtrage test de longueur de coupure $\hat{\Delta} = 2\bar{\Delta}$, utilisé dans la procédure dynamique, est visible sur la dissipation sous-maille du $DEDM$. A partir de $\bar{\Delta}/\Delta = 8$ (soit $\hat{\Delta}/\Delta = 16$ avec Δ le pas de discrétisation spatiale de la grille de résolution de la SND), le filtrage s'effectue dans la zone inertielle, à proximité de l'échelle du forçage. Par conséquent, l'hypothèse de similarité d'échelle est en limite de validité ce qui crée les oscillations de la dissipation sous-maille du $DEDM$ (figure 5.6(b)). Comme

5. On notera qu'il n'y a pas de "logique de numérotation" lorsque l'on progresse le long du front de Pareto

la procédure des coefficients adaptatifs fait appel à des grandeurs calculées à l'échelle de coupure $\bar{\Delta}$, le comportement de la dissipation sous-maille des modèles $ACWM_i$ conserve la même monotonie en fonction de la taille du filtre lorsque $\bar{\Delta}/\Delta > 8$.

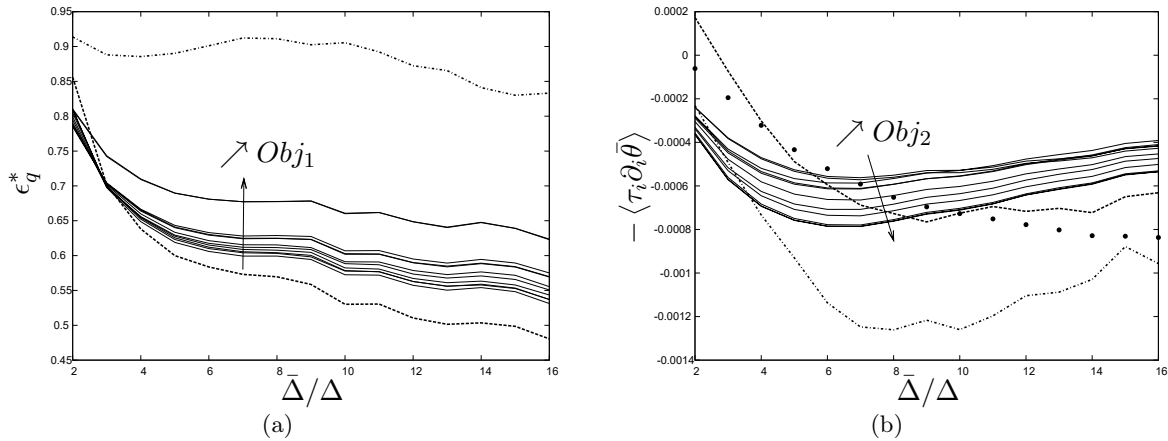


FIGURE 5.6 – Tests *a priori* des modèles $ACWM_i$ générés par les p_i^{inter} . Evolution des erreurs quadratiques normalisées (a) et évolution des dissipations sous-maille (b) en fonction de la taille de filtre $\bar{\Delta}/\Delta$ pour les modèles $DEDM$ (-----), $ANNM$ (-·-·-·-) et $ACWM_i$ (—) en comparaison à la SND filtrée ($\bullet \bullet$).

5.1.3 Tests *a posteriori* et extension à d'autres écoulements

La suite de la validation de $ACWM$ s'effectue via des tests *a posteriori* qui sont présentés dans cette partie. Trois champs de vitesse, statistiquement stationnaires et résolus par SND vont être utilisés pour effectuer les différentes SGE de scalaire de nombre de Schmidt moléculaire $Sc = 0.7$. Leurs caractéristiques sont :

- une THI d'un niveau de turbulence basé sur la micro-échelle de Taylor $Re_\lambda = 90$, résolu sur 256^3 points de grille. Ce champ de vitesse est similaire à celui des tests *a priori* de validation de l'optimisation.
- une autre THI d'un niveau de turbulence basé sur la micro-échelle de Taylor $Re_\lambda = 160$ résolu sur 512^3 points de grille.
- un écoulement de type Kolmogorov⁶ dont les caractéristiques sont similaires à celui utilisé dans les simulations de Sarris *et al.* [84].

La première série de SGE sur le scalaire sera forcée et effectuée avec le champ de vitesse de THI de $Re_\lambda = 90$. Ces simulations seront initialisées par le champ de vitesse et les champs de scalaire filtrés utilisés pour les tests *a priori* et l'entraînement du réseau de neurones. Elles constitueront donc les validations immédiates de ces étapes préliminaires puisqu'elles simuleront un mélange de scalaire forcé, identique à celui utilisé pour obtenir la base de données d'entraînement et de test de l'optimisation. Deux décroissances seront effectuées. La première aura pour initialisation le même champ de scalaire que pour le cas forcé et le test *a priori*. La seconde utilisera un champ de scalaire initialisé aléatoirement par la méthode d'Eswaran & Pope [28]. Ces tests de décroissance de scalaire vont permettre de déterminer les aptitudes prédictives des modèles sous-maille sur des physiques de mélange de scalaire non apprises pendant l'entraînement des réseaux de neurones. Ces champs sont tous résolus sur une grille de 64^3 points. Afin de comparer les résultats des évolutions des statistiques de scalaire de SGE, un champ de scalaire de nombre de Schmidt moléculaire $Sc = 0.7$ et discrétisé sur 256^3 points de grille sera résolu en SND.

La deuxième série de SGE sera effectuée avec deux scalaires discrétisés sur des grilles de 128^3 et

6. Il s'agit d'un écoulement résolu dans un domaine tri-périodique, forcé par un terme source sinusoïdal qui conduit à un champ de vitesse inhomogène [84].

64^3 points. Ils sont mélangés par le champ de vitesse de THI de $Re_\lambda = 160$. Un scalaire de nombre de Schmidt moléculaire $Sc = 0.7$ et résolu par SND sur une grille de 512^3 points est calculé sur ces mêmes configurations pour servir de référence.

Enfin, un écoulement de type Kolmogorov, sur une grille de résolution de 256^3 à un niveau de turbulence basé sur la micro échelle de Taylor $Re_\lambda = 90$, va tester le comportement des modèles sous-maille dans un régime de mélange anisotrope avec un scalaire initialisé aléatoirement par la méthode d'Eswaran & Pope [28].

L'évolution statistique de chaque scalaire résolu est suivie au cours du mélange. Les grandeurs d'intérêt sont la variance statistique $\langle \bar{\theta}^2 \rangle$ et l'enstrophie scalaire $\langle \partial_i \bar{\theta} \partial_i \bar{\theta} \rangle$. Au cours de ces évolutions temporelles, des statistiques instantanées telles que les spectres de variance scalaire et les fonctions de densité de probabilité de scalaire sont également examinées.

Pour ces tests *a posteriori*, le seul modèle $ACWM_i$ testé est celui engendré par l'individu numéro 2 de la figure 5.2(b) car il engendre le modèle qui assure le plus de stabilité tout en ayant la meilleure performance structurelle. Il serait naturel de le comparer au $DNTDM$ car ils partagent la même forme algébrique mais il a été montré que le $DNTDM$ n'avait pas une dissipation sous-maille suffisante pour assurer des simulations de scalaire stables. D'autre part, la comparaison de $ACWM_2$ avec $ANNM$ montrerait que la spécialisation de ce dernier sur la base d'entraînement produit une meilleure prédiction des statistiques de scalaire sur la première série de SGE. Par contre, le manque d'universalité de l' $ANNM$ ne lui permet pas d'effectuer des SGE précises de scalaire pour des configurations qui diffèrent de celle de la base de données utilisée pour entraîner ce modèle (voir le chapitre 4 précédent). Dans tous les tests *a posteriori* présentés, $ACWM_2$ (noté simplement $ACWM$ par la suite) sera comparé au $DEDM$.

THI forcée à $Re_\lambda = 90$ et scalaire forcé $Sc = 0.7$

Cette première SGE de scalaire est résolue sur 64^3 points de grille ce qui représente l'émulation du filtre $\bar{\Delta}/\Delta = 4$ des tests *a priori* de la figure 5.6.

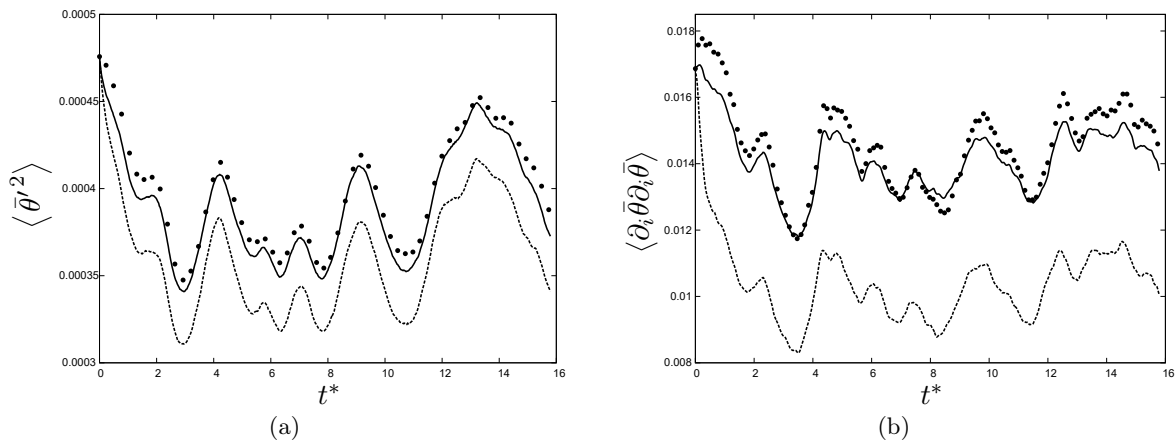


FIGURE 5.7 – Evolution de la variance (a) et de l'enstrophie (b) de scalaire résolu pour les SGE des modèles $ACWM$ (—), $DEDM$ (-----) et de la SND filtrée ($\bullet \bullet$) ($Re_\lambda = 90$, $N_\theta = 64^3$).

Une meilleure prédiction de la variance de scalaire résolu par $ACWM$ est obtenue tout au long de la simulation (figure 5.7(a)). La variance de ce scalaire reste proche de la variance du scalaire de SND filtrée tout en lui étant inférieure. Cette évolution montre le meilleur comportement de $ACWM$ par rapport à $DEDM$. Les mêmes conclusions peuvent être tirées sur l'évolution de l'enstrophie de scalaire ce qui indique une bonne prédiction des gradients de scalaire. Les statistiques instantanées à $t^* = 8.85$ renforcent les conclusions des évolutions temporelles qui viennent d'être évoquées. Les spectres de la

variance de scalaire (figure 5.8(a)) indiquent que les niveaux d'énergie prédits par *ACWM* sont en accord avec ceux du scalaire de la *SND* et présentent une sous-évaluation moindre que celle de *DEDM*, notamment aux petites échelles. Ces conclusions sont également retrouvées sur les fonctions de densité de probabilité (figure 5.8(b)) où la probabilité d'existence des valeurs extrêmes de scalaire résolu avec *ACWM* est plus proche de la *SND* filtrée que celle prédite par *DEDM*. Pour les deux modèles, les valeurs de scalaire au voisinage de la valeur moyenne sont sous-prédites; cependant ce phénomène est moins marqué avec *ACWM*.

D'après ce premier test *a posteriori*, le modèle *ACWM* présente des aptitudes pour la prédiction de scalaire dans des conditions de *SGE* ayant une physique identique à celle utilisée pour la construction de son réseau de neurones. Grâce à sa construction hybride, nous allons voir maintenant s'il est possible de prédire d'autres physiques de mélange tout en gardant les mêmes caractéristiques de turbulence sur le champ de vitesse.

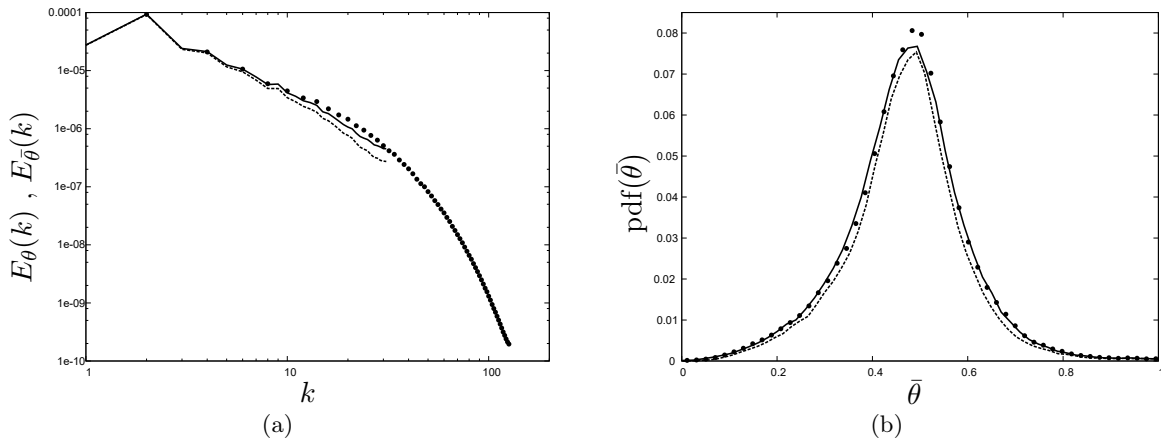


FIGURE 5.8 – Spectre de la variance de scalaire (a) et densité de probabilité de scalaire (b) des SGE des modèles *ACWM* (—), *DEDM* (-----) et du scalaire de *SND* (• •) sur (a) et de la *SND* filtrée sur (b) à $t^* = 8.85$ ($Re_\lambda = 90$, $N_\theta = 64^3$).

THI forcée à $Re_\lambda = 90$ et décroissance de scalaire

Dans cette configuration de *SGE*, le scalaire va décroître librement à partir des mêmes conditions initiales que la *SGE* précédente. Durant cette simulation, la physique simulée va nécessiter un nouveau comportement du modèle sous-maille qui n'a pas été appris par *ACWM*.

Le modèle *ACWM* prédit bien la variance statistique de scalaire résolu par rapport à la *SND* filtrée (figure 5.9(a)). Par contre, l'entrophie de scalaire est sur-prédite par rapport à la *SND* filtrée. Contrairement au *DEDM* qui dissipe rapidement les gradients de scalaire, l'*ACWM* prédit bien le pic d'entrophie dû à la période transitoire postérieure à l'arrêt du forçage. *ANNM* présentait des prédictions d'entrophie scalaire similaires pour cette simulation (figure 4.14(b)). A l'instant où *ACWM* commence à sur-prédire, ses statistiques instantanées du scalaire résolu (figure 5.10) sont en bon accord avec celles de la *SND*. Les spectres de variance des scalaires résolus par la *SND* et *ACWM* affichent des niveaux d'énergie similaires. De plus, les fonctions de densité de probabilité des valeurs de scalaire prédites par *ACWM* sont en accord avec la *SND* filtrée malgré une légère sous-prédiction au voisinage de la moyenne. Sur ces mêmes tests, *ANNM* montrait qu'il sur-prédisait l'énergie des petites échelles de variance de scalaire et les valeurs extrêmes de la fonction de densité de probabilité du scalaire résolu (figure 4.15).

Ce test *a posteriori* montre une première amélioration apportée par *ACWM* par rapport à *ANNM* du point de vue de l'universalité. Les prochains tests *a posteriori* vont montrer que *ACWM* est capable de modéliser efficacement les petites échelles de scalaire pour des simulations de configuration différentes.

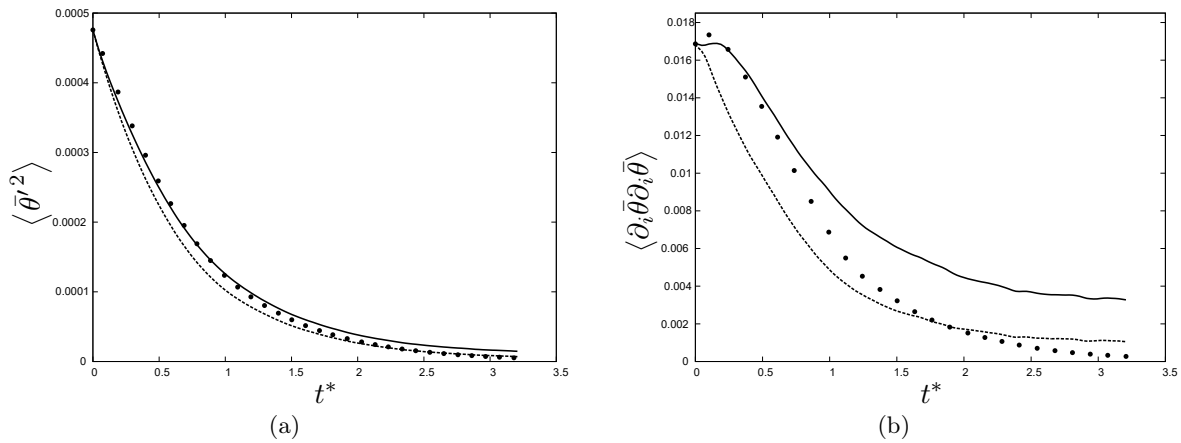


FIGURE 5.9 – Evolution de la variance (a) et de l’ensrophie (b) de scalaire résolu pour les modèles *ACWM* (—), *DEDM* (-----) et de la SCD filtrée ($\bullet \bullet$) ($Re_\lambda = 90$, $N_\theta = 64^3$).

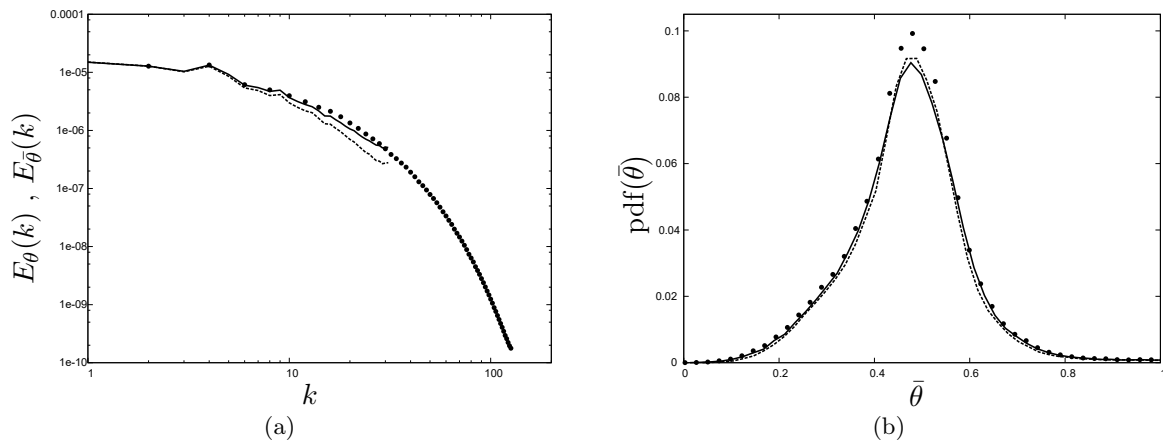


FIGURE 5.10 – Spectre de la variance (a) et densité de probabilité (b) de scalaire des SGE des modèles *ACWM* (—), *DEDM* (-----) et du scalaire de SCD ($\bullet \bullet$) sur (a) et de la SCD filtrée sur (b), à $t^* = 0.64$ ($Re_\lambda = 90$, $N_\theta = 64^3$).

THI forcée à $Re_\lambda = 90$ et décroissance de scalaire avec initialisation aléatoire

Dans cette configuration de test *a posteriori*, le champ de vitesse utilisé à un niveau de turbulence basé sur la micro-échelle de Taylor de $Re_\lambda = 90$ et il est résolu en SCD sur une grille de 256^3 points. Ces SGE simulent le mélange libre des scalaires depuis une initialisation aléatoire selon la méthode d’Eswaran & Pope [28]. Cette configuration constitue un pas supplémentaire vers la simulation d’une physique de scalaire inconnue de *ACWM*.

Le niveau de modélisation du scalaire est tel que sa discrétisation s’effectue sur 64^3 points de grille. Les résultats montrent que *ACWM* prédit mieux la variance et l’ensrophie de scalaire résolu que *DEDM* qui est plus dissipatif (figure 5.11). L’évolution de la variance du scalaire de *ACWM* est très proche de celle du scalaire filtré de SCD. Malgré une meilleure prédiction de l’ensrophie scalaire par le *DEDM* en début de simulation ($t^* < 0.5$) *ACWM* prédit une évolution plus proche de celle du scalaire de SCD filtrée avec une meilleure localisation du pic d’ensrophie. Les statistiques instantanées (figure 5.12) sont calculées à l’instant $t^* = 0.65$ où se produit le pic d’ensrophie du scalaire résolu par la SCD filtrée (figure 5.12). Le spectre de variance et la fonction de densité de probabilité du scalaire de *ACWM* sont plus proches des prédictions du scalaire de SCD filtrée tout en étant légèrement sur-dissipatif. Au même moment, *DEDM* sous-estime les niveaux de variance dès $k = 6$ (figure 5.12(a)),

et les probabilités d'existence de toutes les valeurs de scalaire (figure 5.12(b)).

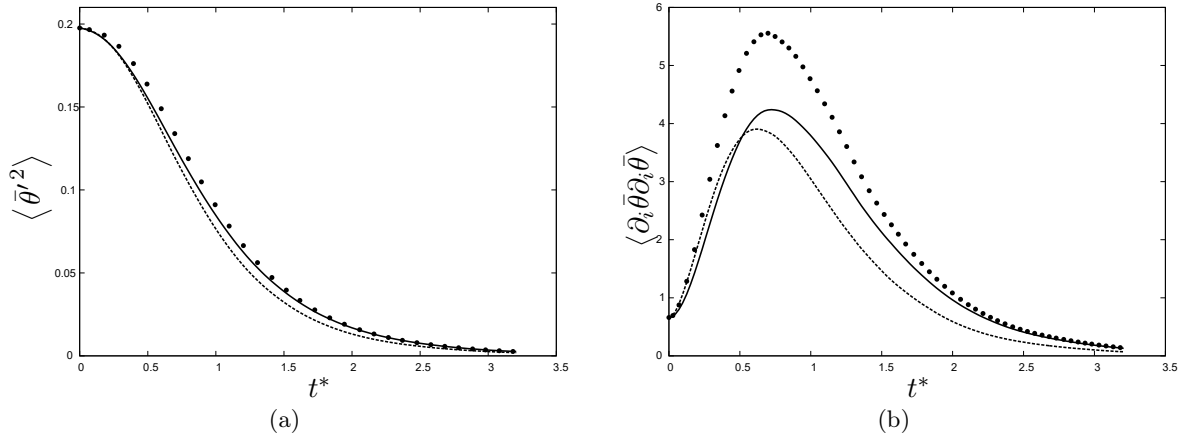


FIGURE 5.11 – Evolution de la variance (a) et de l'enstrophie (b) de scalaire résolu pour les SGE des modèles *ACWM* (—), *DEDM* (-----) et de la SND filtrée ($\bullet \bullet$) ($Re_\lambda = 90$, $N_\theta = 64^3$).

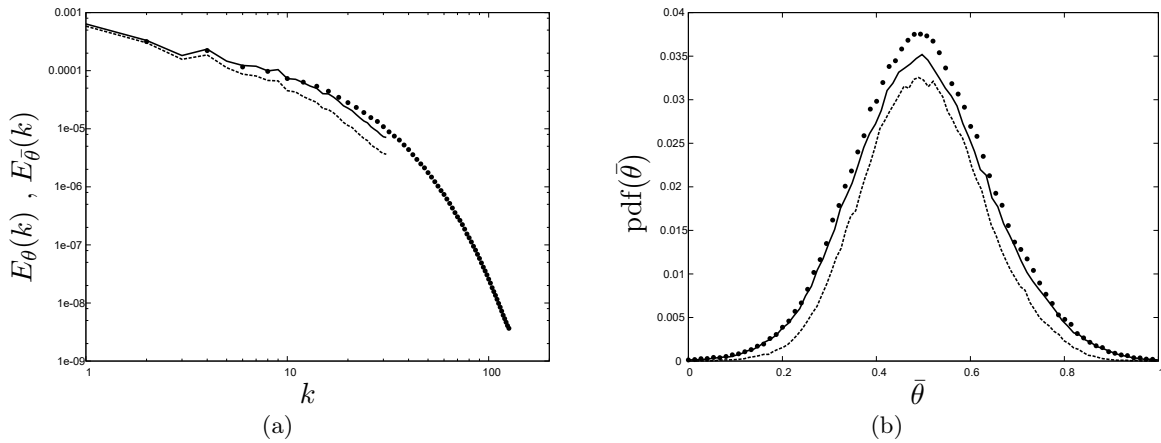


FIGURE 5.12 – Spectre de la variance (a) et densité de probabilité (b) de scalaire des SGE des modèles *ACWM* (—), *DEDM* (-----) et du scalaire de SND ($\bullet \bullet$) sur (a) et de la SND filtrée (b) à $t^* = 0.62$ ($Re_\lambda = 90$, $N_\theta = 64^3$).

THI forcée à $Re_\lambda = 160$ et scalaire forcé

Dans les deux prochaines SGE, le champ turbulent sera tel que $Re_\lambda = 160$ soit presque le double en comparaison du champ qui a servi pour l'entraînement. Dans la première configuration, les SGE des scalaires forcés sont discrétisés sur des résolutions de 128^3 points soit une taille de filtre implicite de $\bar{\Delta}/\Delta = 4$ pour cette configuration.

ACWM produit de meilleures prédictions que le *DEDM* sur les évolutions temporelles (figure 5.13) et sur les statistiques instantanées (figure 5.14).

Dans la précédente configuration de scalaire forcé, nous avons cherché à augmenter la part modélisée du scalaire. Le scalaire de cette SGE était résolu sur une grille de 32^3 points (soit l'émulation d'une longueur de coupure de $\bar{\Delta}/\Delta = 8$) et *ACWM* ne produisait pas de prédiction de statistiques stables dans le temps, au point de faire diverger les valeurs de scalaire. Une SGE (utilisant *ACWM*) avec le champ de vitesse à $Re_\lambda = 160$ et ce même rapport entre la plus petite échelle résolue et l'échelle de dissipation a été menée. Dans cette configuration, la résolution de scalaire émulée par l'échelle de coupure implicite $\bar{\Delta}/\Delta = 8$ est effectuée sur une grille de 64^3 points. Les résultats du scalaire pour

ACWM montrent des statistiques stables durant la simulation. Cependant la variance du scalaire (figure 5.15(a)) est largement sur-prédite par rapport au scalaire de la *SND* filtrée. L'enstrophie scalaire (figure 5.15(b)) est elle aussi sur-prédite. Enfin des conclusions similaires peuvent être tirées sur le spectre de variance de scalaire (figure 5.16(a)) et la fonction de densité de probabilité (figure 5.16(b)).

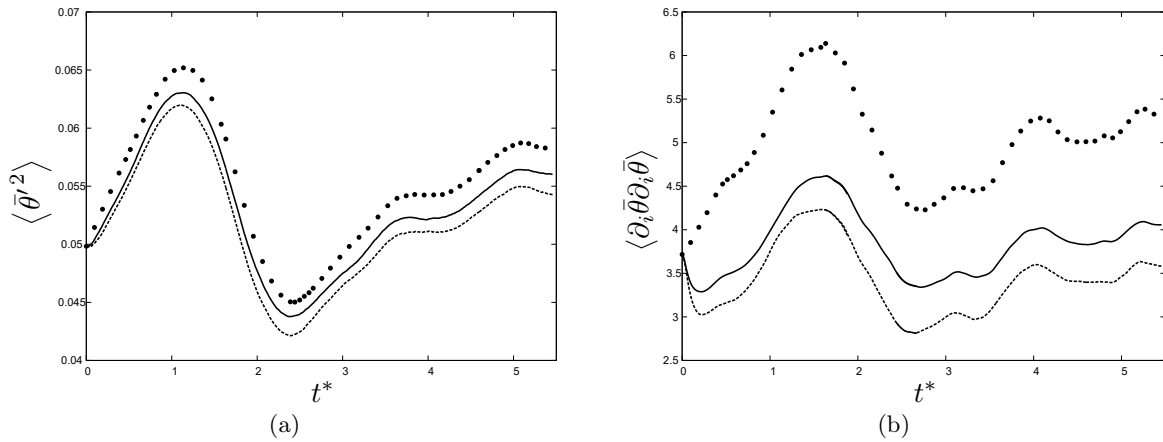


FIGURE 5.13 – Evolution de la variance (a) et de l'enstrophie (b) de scalaire résolu pour les SGE des modèles *ACWM* (—), *DEDM* (-----) et de la *SND* filtrée (• •) ($Re_\lambda = 160$, $N_\theta = 128^3$).

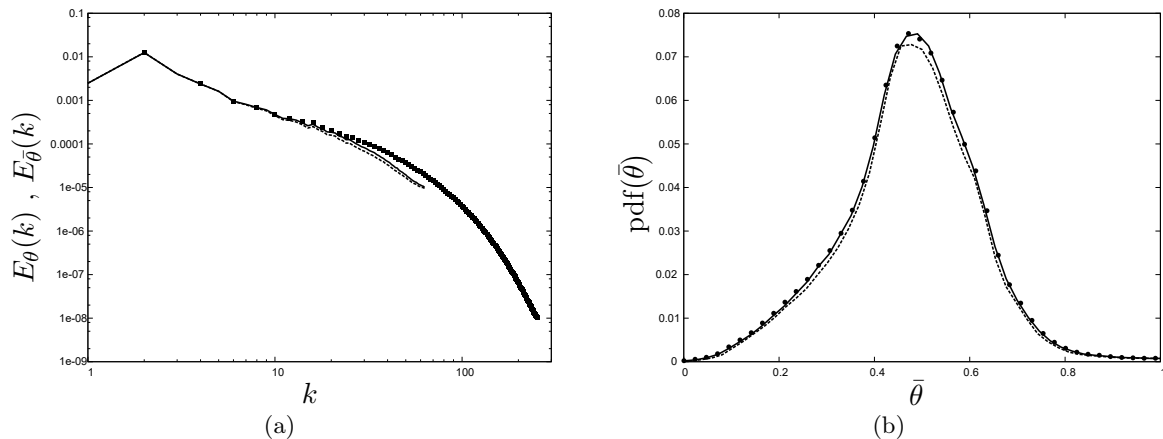


FIGURE 5.14 – Spectre de la variance (a) et densité de probabilité (b) de scalaire des SGE des modèles *ACWM* (—), *DEDM* (-----) et du scalaire de *SND* (• •) sur (a) et de la *SND* filtrée sur (b) à $t^* = 4.59$ ($Re_\lambda = 160$, $N_\theta = 128^3$).

Cette différence de résultats pour *ACWM* aux mêmes rapports de coupure entre les plus petites échelles résolues et l'échelle dissipative peut s'expliquer par le nombre de couches de vecteurs d'onde séparant l'échelle de forçage et la plus petite échelle résolue. Les SGE dont les scalaires sont résolus sur 32^3 points ont leurs plus petites échelles résolues influencées par le forçage du scalaire et de la vitesse qui s'effectuent dans la gamme des nombres d'ondes $k = 2$ et $k = 3$. Ces échelles ne sont séparées que de 13 couches de nombres d'onde. Alors que dans le cas des SGE de scalaire résolu sur 64^3 points de grille et mélangé par le champ de vitesse de $Re_\lambda = 160$, il y a 30 couches de nombres d'onde qui séparent les échelles du forçage et les plus petites échelles résolues. On peut ainsi penser que les plus petites échelles résolues sont moins influencées par les grandes échelles où se produit le forçage.

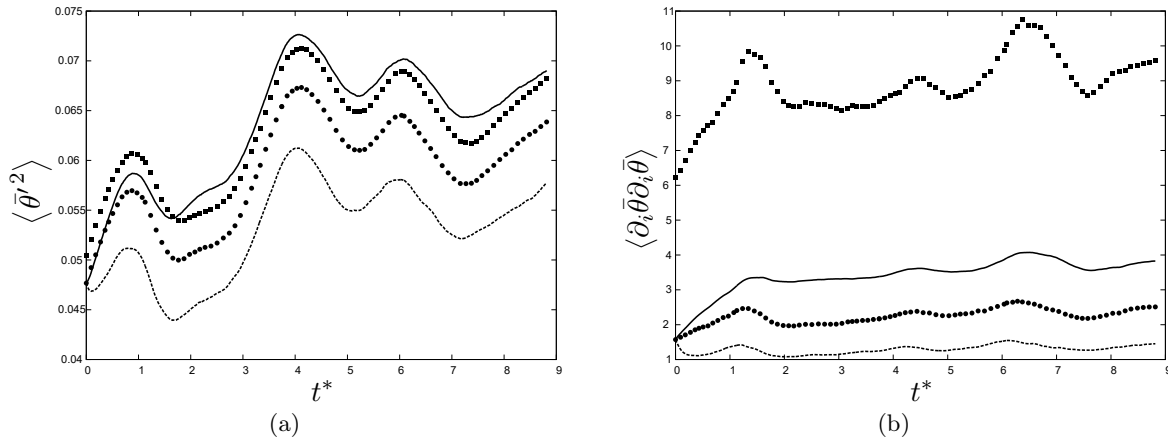


FIGURE 5.15 – Evolution de la variance (a) et de l’entrophie (b) de scalaire résolu pour les SGE des modèles *ACWM* (—), *DEDM* (-----), la SND filtrée ($\bullet \bullet$) et la SND ($\blacksquare \blacksquare$) ($Re_\lambda = 160$, $N_\theta = 64^3$).

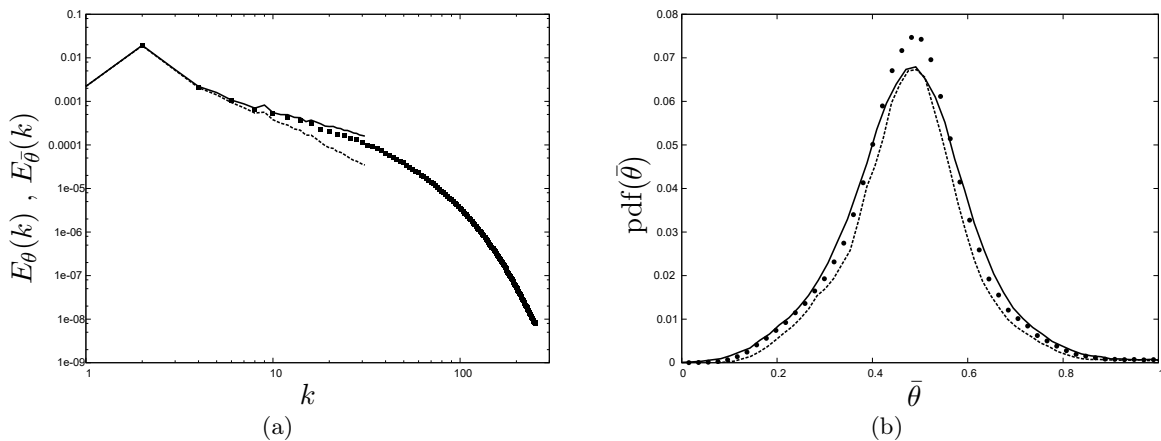


FIGURE 5.16 – Spectre de la variance (a) et densité de probabilité (b) de scalaire des SGE des modèles *ACWM* (—), *DEDM* (-----), du scalaire de SND filtrée ($\bullet \bullet$) et de la SND ($\blacksquare \blacksquare$) à $t^* = 3.68$ ($Re_\lambda = 160$, $N_\theta = 64^3$).

Forçage de Kolmogorov et décroissance de scalaire

Le forçage de type Kolmogorov sur le champ de vitesse ajoute un gradient moyen non nul à une des composantes de la vitesse ce qui permet de tester l’adaptation du calcul des coefficients du réseau de neurones et plus globalement, la réponse du modèle à un champ de vitesse anisotrope.

Les SGE des scalaires sont effectuées pour des résolutions de 64^3 points de grille. Le champ initial est le même que celui utilisé pour la décroissance en THI du paragraphe 5.1.3. Malgré le changement de champ de vitesse, les conclusions sur les statistiques globales de mélange de scalaire sont semblables. Dans les deux cas, *ACWM* démontre qu’il dissipe suffisamment pour permettre au scalaire d’avoir des fluctuations globales (la variance sur la figure 5.17(a)) et spatiales (l’entrophie sur la figure 5.17(b)), inférieures à celles du scalaire filtré de la SND. L’instant où se produit le pic d’entrophie sert de référence pour calculer les statistiques instantanées (figure 5.18). Celles-ci montrent un bon comportement de *ACWM* puisque le spectre de la variance de scalaire qu’il produit se situe entre le spectre du scalaire résolu par *DEDM* et celui du scalaire résolu par SND (figure 5.18(a)). A cet instant, la fonction de densité de probabilité présente encore les deux pics représentatifs de l’injection initiale de scalaire (figure 5.18(b)). La fonction de densité de probabilité du scalaire de *ACWM* est très proche de celle du scalaire filtré de la SND pour les valeurs extrêmes et les valeurs au voisinage de la moyenne. Au voisinage des pics, le scalaire résolu par *DEDM* est un peu plus fidèle à la SND filtrée que *ACWM*.

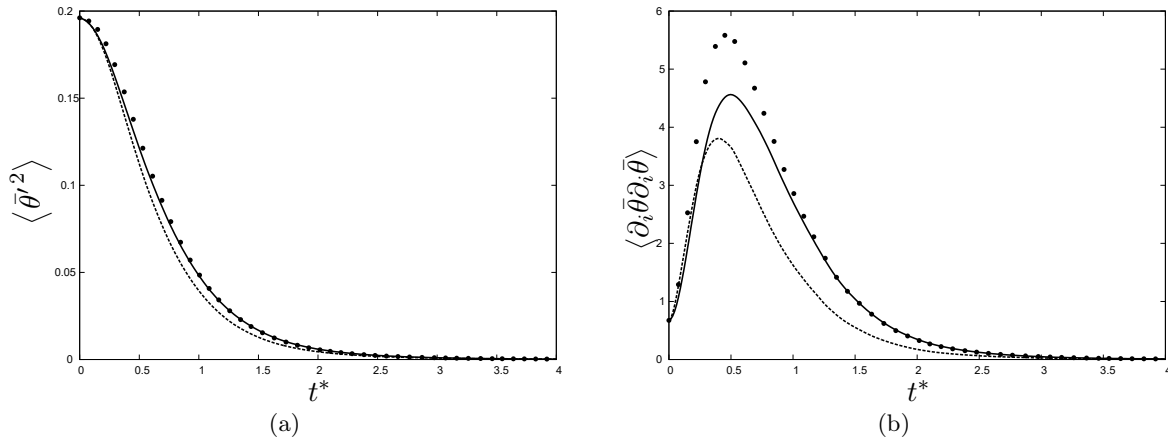


FIGURE 5.17 – Evolution de la variance (a) et de l’entrophie (b) des scalaires des SGE résolus avec les modèles *ACWM* (—), *DEDM* (-----) et du scalaire de *SND* (• •) ($Re_\lambda = 91$, $N_\theta = 64$).

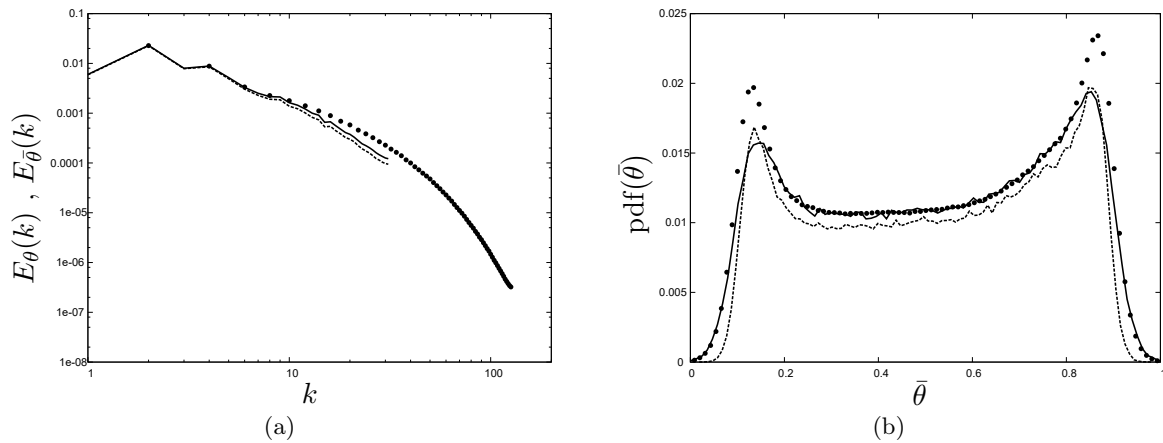


FIGURE 5.18 – Spectre de la variance (a) et densité de probabilité (b) de scalaire des SGE des modèles *ACWM* (—), *DEDM* (-----) et du scalaire de *SND* (• •) sur (a) et de *SND* filtrée sur (b) à $t^* = 0.54$ ($Re_\lambda = 91$, $N_\theta = 64$).

5.1.4 Conclusion

Le modèle *ACWM* est un modèle hybride qui combine une formulation algébrique conventionnelle et l’utilisation d’un réseau de neurones pour déterminer l’adaptation dynamique des coefficients du modèle algébrique. La construction du modèle nécessite une phase d’apprentissage du réseau de neurones sur une base de données issue de *SND* à la manière du modèle *ANNM*. Une procédure d’apprentissage multiobjectifs a été mise en place afin d’obtenir un ensemble d’individus générant des $ACWM_i$ performants. De cet ensemble a été extrait un individu sélectionné pour être celui qui engendre le modèle *ACWM* avec la meilleure performance structurelle.

Les tests *a priori* ont montré que le modèle *ANNM* avait de meilleures performances que *ACWM* sur sa base de données d’entraînement ce qui est logique compte tenu de la sur-spécialisation de *ANNM* par rapport à cette base d’entraînement. L’utilisation d’une base de données supplémentaire pour construire *ACWM* évite cette sur-spécialisation. En effet, d’après les tests *a posteriori*, *ACWM* a un comportement plus universel car il permet de simuler des évolutions de scalaires dans une gamme de configurations plus large que *ANNM*.

Les limites de l’universalité de *ACWM* ont cependant aussi été montrées dans les SGE du scalaire :

- en décroissance depuis l’état de mélange stationnaire,

— forcé et discrétisé sur une grille de 64^3 points et mélangé par le champ de vitesse de $Re_\lambda = 160$. En dépit de ces limites, *ACWM* offre un meilleur niveau de performances que le modèle *ANNM*. Ces performances améliorées ont été permises grâce à la formulation hybride qui combine les aptitudes structurelles de la partie apprentissage supervisé et l'universalité d'une formulation algébrique conventionnelle.

Avant de tirer des conclusions plus générales sur cette méthode de construction de modèles, nous souhaitons l'employer de nouveau pour modéliser cette fois le tenseur sous-maille de l'équation de quantité de mouvement filtrée.

5.2 Coefficients adaptatifs pour le modèle de Lund & Novikov

Dans cette partie, la procédure de calcul des coefficients adaptatifs de *ACWM* est transposée à un modèle sous-maille pour l'équation de quantité de mouvement. Ce modèle a été proposé par Lund & Novikov [55] qui ont appliqué la décomposition tensorielle de Spencer & Rivlin [88] au tenseur sous-maille

$$\tau_{ij} = \overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j \quad (5.20)$$

dans le but de proposer un modèle ayant une meilleure corrélation avec le tenseur sous-maille exact que le modèle de Smagorinsky à coefficient statique [86].

La décomposition s'écrit sous la forme d'un polynôme de 11 monômes composés des tenseurs $\bar{\Omega}_{ij}$ et \bar{S}_{ij} . Rivlin & Ericksen [76] ont montré que les monômes d'ordre supérieur à 3 peuvent être générés par les 6 premiers monômes d'ordre inférieur ou égal à 3 de cette décomposition polynomiale. Par conséquent, une décomposition tensorielle du tenseur sous-maille de l'équation de quantité de mouvement filtrée (1.41) se réduit à :

$$\begin{aligned} \tau_{ij} = & \chi_1 \bar{\Delta}^2 |\bar{S}| \bar{S}_{ij} + \chi_2 \bar{\Delta}^2 (\bar{S}_{ik} \bar{S}_{kj})^d + \chi_3 \bar{\Delta}^2 (\bar{\Omega}_{ik} \bar{\Omega}_{kj})^d + \\ & \chi_4 \bar{\Delta}^2 (\bar{S}_{ik} \bar{\Omega}_{kj} - \bar{\Omega}_{ik} \bar{S}_{kj}) + \chi_5 \bar{\Delta}^2 / |\bar{S}| (\bar{S}_{ik} \bar{S}_{kl} \bar{\Omega}_{lj} - \bar{\Omega}_{il} \bar{S}_{lk} \bar{S}_{kj}) \end{aligned} \quad (5.21)$$

avec \cdot^d la partie déviatoire telle que $a_{ij}^d = a_{ij} - 1/3 a_{kk}$ et les χ_i des fonctions vectorielles des invariants de $\bar{\Omega}_{ij}$ et \bar{S}_{ij} :

$$\begin{aligned} I_1 &= \text{tr}(\bar{\mathbf{S}}^2), \quad I_2 = \text{tr}(\bar{\mathbf{\Omega}}^2), \quad I_3 = \text{tr}(\bar{\mathbf{S}}^3), \\ I_4 &= \text{tr}(\bar{\mathbf{S}}\bar{\mathbf{\Omega}}^2) \quad \text{et} \quad I_5 = \text{tr}(\bar{\mathbf{S}}^2\bar{\mathbf{\Omega}}^2), \end{aligned} \quad (5.22)$$

avec $\bar{\mathbf{S}}^2 = \bar{S}_{ik} \bar{S}_{kj}$. Le premier terme de la décomposition (5.21) fait apparaître l'expression algébrique du modèle *DSM*. Le modèle complet⁷ proposé par Lund & Novikov [55] est la combinaison des relations (5.21) et (5.22). Il reste à déterminer une procédure de calcul des coefficients χ_i , ce qui revient à construire une fonction de substitution vectorielle de $\chi : \mathbb{R}^5 \rightarrow \mathbb{R}^5$.

En appliquant les méthodes employées pour la construction des coefficients adaptatifs de *ACWM*, le modèle *ACLNM* pour "Adaptative Coefficient of Lund & Novikov Model" s'écrit :

$$\begin{aligned} \tau_{ij}^{ACLNM} = & g_1|_{\mathbf{p}}(\phi) \bar{\Delta}^2 |\bar{S}| \bar{S}_{ij} + g_2|_{\mathbf{p}}(\phi) \bar{\Delta}^2 (\bar{S}_{ik} \bar{S}_{kj})^d + g_3|_{\mathbf{p}}(\phi) \bar{\Delta}^2 (\bar{\Omega}_{ik} \bar{\Omega}_{kj})^d + \\ & g_4|_{\mathbf{p}}(\phi) \bar{\Delta}^2 (\bar{S}_{ik} \bar{\Omega}_{kj} - \bar{\Omega}_{ik} \bar{S}_{kj}) + g_5|_{\mathbf{p}}(\phi) \bar{\Delta}^2 (\bar{S}_{ik} \bar{S}_{kl} \bar{\Omega}_{lj} - \bar{\Omega}_{il} \bar{S}_{lk} \bar{S}_{kj}) \end{aligned} \quad (5.23)$$

7. Dans leur publication [55], Lund & Novikov proposent de ne s'intéresser qu'à un nombre restreint de ces monômes afin de simplifier le modèle

avec $\phi = (I_1, I_2, I_3, I_4, I_5)$ et \mathbf{p} les paramètres du réseau de neurones (5.9). La topologie de ce réseau est prise avec deux couches de neurones cachés ayant chacune 9 et 7 neurones :

$$\{5, 5, 9, 7\} \quad (5.24)$$

en référence à la notation (4.4.1). Cette topologie représente 164 paramètres à fixer à l'issue de l'entraînement de ce réseau. Celui-ci est effectué avec la base de données de THI statistiquement stationnaire et de niveau de turbulence basé sur un $Re_\lambda = 90$. Une optimisation bi-objectifs sur les performances structurelles et fonctionnelles est mise en place avec les critères :

$$c_1(\bar{\Delta}/\Delta, \mathbf{p}) = \frac{\sum_i \langle (\partial_j \tau_{ij}^{SND} - \partial_j \tau_{ij}^{ACLM})^2 \rangle}{\sum_i (\langle \partial_j \tau_{ij}^{SND} \partial_j \tau_{ij}^{SND} \rangle - \langle \partial_j \tau_{ij}^{SND} \rangle \langle \partial_j \tau_{ij}^{SND} \rangle)} \quad c_2(\bar{\Delta}/\Delta, \mathbf{p}) = \left| \frac{\langle \bar{S}_{ij} \tau_{ij}^{SND} \rangle - \langle \bar{S}_{ij} \tau_{ij}^{ACLM} \rangle}{\langle \bar{S}_{ij} \tau_{ij}^{SND} \rangle} \right|, \quad (5.25)$$

qui sont respectivement l'erreur quadratique du vecteur sous-maille et l'erreur relative de dissipation sous-maille du modèle avec la dissipation sous-maille exacte, à taille de filtre fixée. Le processus d'optimisation suit un schéma similaire à celui de la figure 5.1 avec pour objectifs :

$$\min_{\mathbf{p}} Obj_1 = \max_{\bar{\Delta}/\Delta} [c_1(\bar{\Delta}/\Delta, \mathbf{p})] \quad \min_{\mathbf{p}} Obj_2 = \max_{\bar{\Delta}/\Delta} [c_2(\bar{\Delta}/\Delta, \mathbf{p})] \quad \text{et} \quad \bar{\Delta}/\Delta \in \{4, 8, 12, 16\}. \quad (5.26)$$

5.2.1 Résultats de l'optimisation

L'algorithme d'optimisation de type MOGA a généré 10^6 individus $\{\mathbf{p}\}_G$ répartis sur 1317 générations d'individus. Les résultats du processus d'optimisation des paramètres du réseau de neurones (5.24) sur la base de données de THI sont présentés sur les figures 5.19. Les individus sont représentés dans le plan des objectifs et sont colorés par leur appartenance au $n^{\text{ième}}$ rang de front de Pareto. Le front de Pareto global $\{\mathbf{p}\}^{train}$ est étendu selon les deux objectifs.

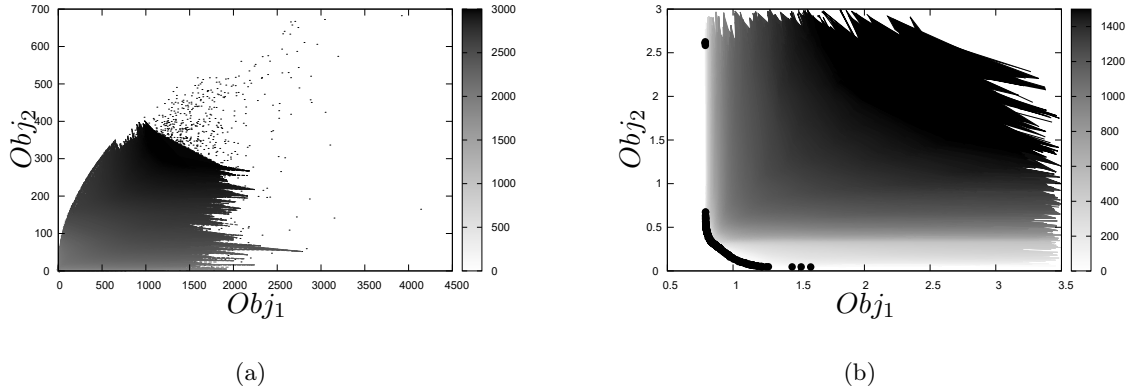


FIGURE 5.19 – (a) Représentation globale des individus de l'optimisation des coefficients adaptatifs du modèle *ACLM*. (b) Zoom sur les individus du front de Pareto global $\{\mathbf{p}\}^{train}$ (\bullet). Les niveaux de gris représentent le rang des fronts de Pareto.

Afin de choisir les individus générant les modèles *ACLM* les plus universels possibles dans $\{\mathbf{p}\}^{train}$, les objectifs des individus $\{\mathbf{p}\}_G$ ont été calculés sur une nouvelle base de données de test qui est la même que celle utilisée pour *ACWM*. Un nouveau front de Pareto global $\{\mathbf{p}\}^{test}$ est construit avec ce nouvel ensemble de valeurs d'objectifs. La figure 5.20(a) montre les individus des ensembles $\{\mathbf{p}\}^{train}$ et $\{\mathbf{p}\}^{test}$ dans le plan des objectifs calculés sur la base de données d'entraînement. Le résultat de l'optimisation est choisi comme étant l'ensemble des individus formant l'intersection des fronts de Pareto globaux des individus calculés sur la base de données d'entraînement et de test $\{\mathbf{p}\}^{inter} = \{\mathbf{p}\}^{train} \cap \{\mathbf{p}\}^{test}$. Cet

ensemble est représenté sur les figures 5.20 par les symboles (\circ). Il est constitué de 4 individus ayant des valeurs d'objectifs similaires qui sont regroupées dans un intervalle d'amplitude inférieure à 1% de la plus petite valeur d'objectif.

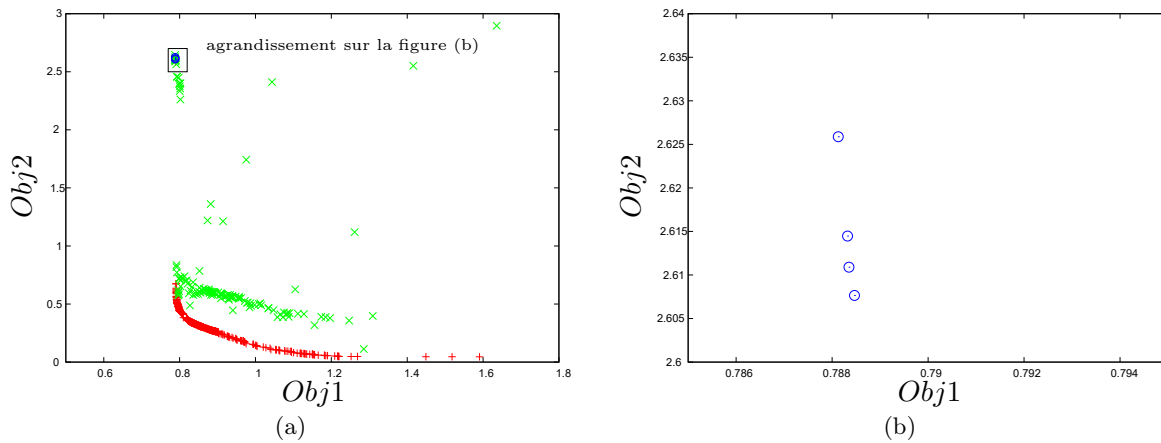


FIGURE 5.20 – (a) Représentation des individus des fronts de Pareto globaux calculés sur la base de données d'entraînement $\{\mathbf{p}\}^{train}$ (+) et sur la base de données de test $\{\mathbf{p}\}^{test}$ (\times). Les symboles (\circ) représentent l'intersection des deux ensembles d'individus. (b) Agrandissement de la zone du plan des objectifs où se trouvent les individus formant l'intersection des deux fronts de Pareto (\circ).

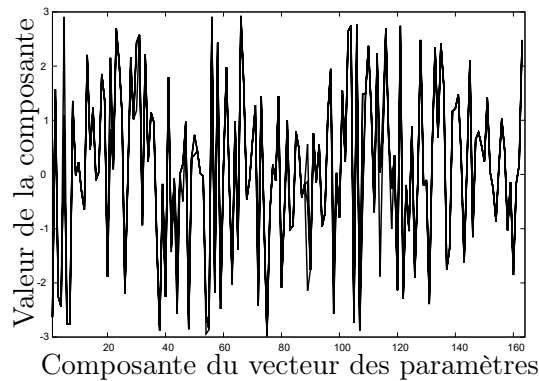


FIGURE 5.21 – Valeurs des composantes des vecteurs des 4 individus de l'ensemble $\{\mathbf{p}\}^{inter}$ intersectant les deux fronts de Pareto 5.20(b) pour *ACLNM*

Sur la figure 5.21 sont représentées les valeurs des paramètres de ces individus, *i.e.* les valeurs des paramètres des réseaux de neurones. Cette figure 5.21 montre que ces individus sont très proches les uns des autres dans l'espace des paramètres. Afin de se donner une idée de la plus grande dimension séparant les deux vecteurs de paramètres les plus éloignés dans l'hypervolume occupé par l'ensemble $\{\mathbf{p}\}^{inter}$, le rapport entre la norme L_2 des vecteurs séparant deux solutions et la plus grande dimension de l'hypervolume est effectué. Cette dernière dimension est calculée avec les bornes des intervalles de variations des composantes des paramètres. En définitive, l'écart relatif entre les solutions de $\{\mathbf{p}\}^{inter}$ s'exprime comme :

$$\frac{\|p_k - p_l\|_{L_2}}{6\sqrt{164}} \quad \text{avec } k \neq l \quad \text{et } p_i \in \{\mathbf{p}\}^{inter}. \quad (5.27)$$

Le plus grand écart relatif entre les paramètres de ces individus représente moins de 3% de la plus grande dimension de l'espace complet des paramètres au sens de la norme L_2 . Ce résultat confirme la proximité des individus solutions de cette optimisation dans le plan des paramètres.

Les 4 modèles générés par les individus de l'ensemble $\{\mathbf{p}\}^{inter}$ privilégient les performances struc-

turelles au détriment de la performance fonctionnelle. Des individus de la partie "continue" du front de Pareto global de la figure 5.20(a), *i.e.* ceux se situant "en bas à gauche" dans le plan des objectifs, montrent : des performances structurelles équivalentes bien que légèrement supérieures aux individus de $\{\mathbf{p}\}^{inter}$, des performances fonctionnelles accrues. Cependant, ils ne se généralisent pas sur la base de données de test puisqu'ils n'apparaissent pas dans l'intersection⁸. Les tests *a priori* vont déterminer leurs performances sur la base de données d'entraînement.

Les modèles *ACLNM* engendrés par les individus $\{\mathbf{p}\}^{inter}$ seront désormais notés $ACLNM^{inter}$. De façon analogue, les modèles créés par les individus du front de Pareto global de la base d'entraînement seront notés $ACLNM^{train}$.

5.2.2 Tests *a priori*

Les modèles générés par les individus du front de Pareto global $ACLNM^{train}$ et les modèles $ACLNM^{inter}$ sont testés pour leurs critères de performances structurelles et fonctionnelles sur la base de données d'entraînement en fonction des différentes tailles de filtre. Les modèles $ACLNM^{inter}$ sont donc comparés à tous les modèles construits avec les individus dominant toutes les autres solutions de l'optimisation. Ces résultats sont représentés sur les figures 5.22.

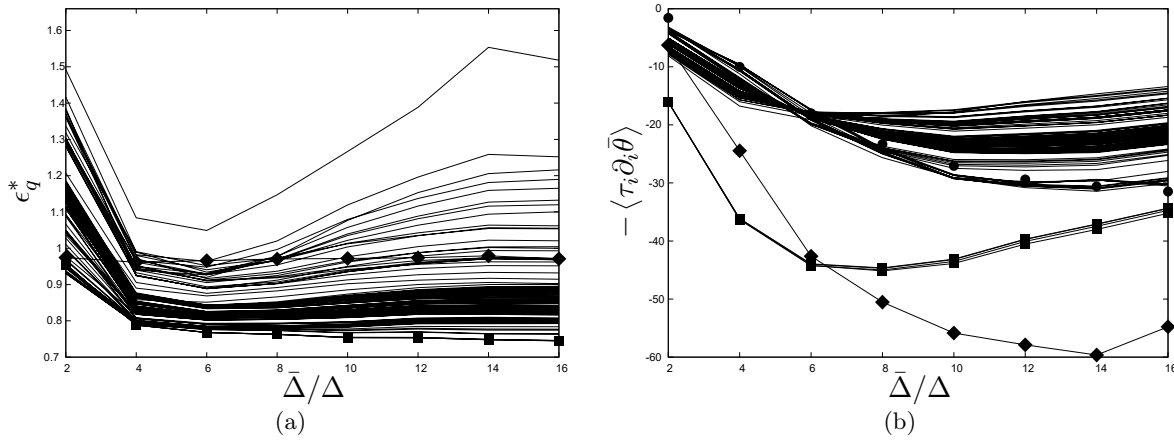


FIGURE 5.22 – Tests *a priori* des modèles *ACLNM* générés par les individus \mathbf{p}^{train} . (a) Evolution des erreurs quadratiques normalisées. (b) Evolution des dissipations sous-maille en fonction de la taille de filtrage $\bar{\Delta}/\Delta$ des modèles *DSM* (\blacklozenge), $ACLNM^{inter}$ (\blacksquare), $ACLNM^{train}$ (—) en comparaison avec la *SND* filtrée ($\bullet \bullet$).

Les individus de $\{\mathbf{p}\}^{inter}$ montraient des valeurs d'objectifs et de paramètres très proches et cela se vérifie sur les tests *a priori*. La figure 5.22(a) montre l'erreur quadratique normalisée ϵ_q^* des modèles $ACLNM^{train}$, $ACLNM^{inter}$ et *DSM*. Les résultats des performances structurelles des modèles $ACLNM^{train}$ sont conformes aux valeurs de l'objectif Obj_1 observés pour les individus de l'optimisation. Comme les modèles $ACLNM^{inter}$ sont issus des meilleurs individus sur cet objectif, ils ont la plus faible erreur quadratique et sont environ 20% plus performants que *DSM*.

Sur la figure 5.22(b) sont représentés les dissipations sous-maille de l'énergie cinétique des modèles. Parmi les individus $\{\mathbf{p}\}^{train}$ certains ont des valeurs d'objectif Obj_2 de l'ordre de 10^{-2} . D'après la définition de cet objectif (5.26), cela signifie que pour les tailles de filtre $\bar{\Delta}/\Delta = \{4, 8, 12, 16\}$, la dissipation sous-maille de leur modèle estime la dissipation sous-maille exacte avec une erreur de l'ordre de 1%. Les performances fonctionnelles de ces modèles se retrouvent sur les tests *a priori* avec ces quelques évolutions de dissipations sous-maille proches de la dissipation exacte. Ces mêmes modèles produisent

8. Les modèles engendrés par les individus de la zone dite "continue" qui s'approchent en performance structurelle des individus de $\{\mathbf{p}\}^{inter}$ ont été testés *a posteriori* sur les configurations de la partie 5.2.3. Ces modèles déstabilisaient la simulation ce qui montre que la généralisation des modèles est prépondérante devant les résultats de performance sur une unique base de données

une erreur quadratique supérieure à l'unité. En examinant l'évolution de la dissipation sous-maille des $ACLNM^{train}$ en fonction de l'augmentation de la valeur de l'objectif Obj_2 , les modèles deviennent sur-dissipatifs pour $\bar{\Delta}/\Delta < 6$ et sous-dissipatifs pour $\bar{\Delta}/\Delta > 6$, jusqu'à atteindre les individus $\{\mathbf{p}\}^{inter}$ qui deviennent entièrement sur-dissipatifs. Les modèles $ACLNM^{inter}$ sont plus dissipatifs que le DSM pour $\bar{\Delta}/\Delta < 6$. Le mode de sélection des individus $\{\mathbf{p}\}^{inter}$ parmi le front de Pareto global $\{\mathbf{p}\}_G$ de la base de données d'entraînement privilégie les modèles à faible erreur quadratique et forte sur-dissipation sous-maille. La topologie du réseau de neurones ne permet pas de capturer une forme fonctionnelle combinant simultanément de bonnes réalisations des objectifs Obj_1 et Obj_2 simultanément. Ils sont donc antagonistes et cela justifie l'optimisation bi-objectifs.

En conclusion de ces tests *a priori*, la similarité des modèles $ACLNM^{inter}$ permet de n'en tester qu'un qui sera noté $ACLNM$. Ce modèle risque de ne pas donner entière satisfaction pour les SGE de grandes résolutions par rapport au DSM car malgré ses aptitudes structurelles, sa performance fonctionnelle reste inférieure à celle du DSM . Par conséquent, $ACLNM$ va être testé *a posteriori* comparativement au DSM pour des SGE au filtrage implicite de $\bar{\Delta}/\Delta = 8$.

5.2.3 Tests *a posteriori*

Dans les tests *a posteriori* suivants, $ACLNM$ est comparé au DSM . Les performances structurelles accrues de $ACLNM$ devraient améliorer les prédictions de son champ de vitesse par rapport à celui du DSM . Pour ces tests, deux simulations de décroissance sont effectuées, toutes deux avec $\bar{\Delta}/\Delta = 8$. Ces deux décroissances seront initialisées par des THI de champs de vitesse de niveau de turbulence basé sur la micro-échelle de Taylor $Re_\lambda = 90$ et $Re_\lambda = 160$. Ces champs seront issus du filtrage explicite des bases de données SND de respectivement 256^3 et 512^3 points de grille. La première base de données est celle servant pour l'entraînement du réseau du modèle $ACLNM$. Dans la suite, nous commenterons simultanément les résultats de ces deux simulations.

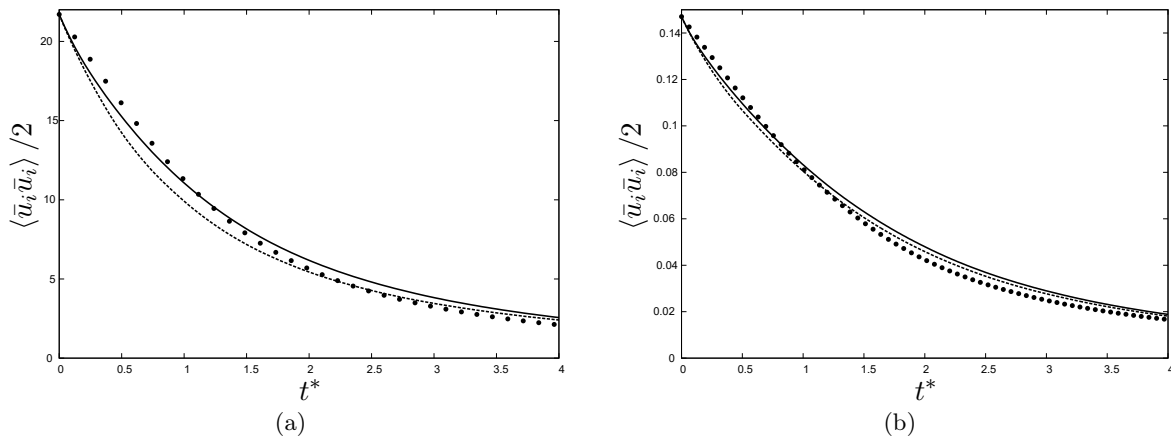


FIGURE 5.23 – Evolution de l'énergie cinétique des champs de vitesse en SGE avec les modèles sous-maille $ACLNM$ (—) DSM (-----) et la SND filtrée (\bullet) pour les résolutions de 32^3 points à $Re_\lambda = 90$ (a) et 64^3 points à $Re_\lambda = 160$ (b).

Les premières figures 5.23 montrent l'évolution de l'énergie cinétique par rapport à la SND filtrée. Pour les deux niveaux de turbulence, $ACLNM$ prédit une énergie cinétique résolue plus proche de la SND filtrée que DSM pour les deux niveaux de turbulence. Cette meilleure prédiction se retrouve sur l'évolution de la dissipation d'énergie cinétique résolue des modèles (figure 5.24) où $ACLNM$ surestime moins cette dissipation que DSM . Enfin, les spectres instantanés de l'énergie cinétique (figures 5.25) montrent que $ACLNM$ produit un champ de vitesse dont les amplitudes d'énergie dans chaque couche de vecteur d'onde sont plus proches de la SND que DSM . Ces résultats sont plus marqués sur la SGE de 32^3 alors que les résultats de la SGE de 64^3 de $ACLNM$ semblent montrer un niveau de dissipation plus proche de celui du DSM .

Des conclusions semblables peuvent être tirées sur l'enstrophie résolue, Fig. 5.26(a) et sur son transfert sous-maille, Fig. 5.27 pour les deux configurations de décroissance.

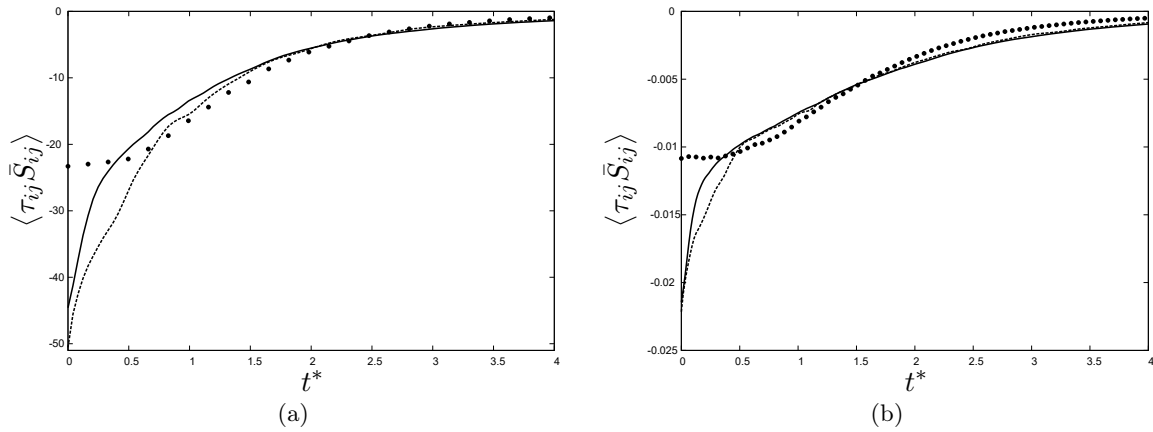


FIGURE 5.24 – Evolution de la dissipation sous-maille de l'énergie cinétique des modèles sous-maille *ACLNM* (—) *DSM* (-----) et la SGE filtrée (• •) pour les résolutions de 32^3 points à $Re_\lambda = 90$ (a) et 64^3 points à $Re_\lambda = 160$ (b).

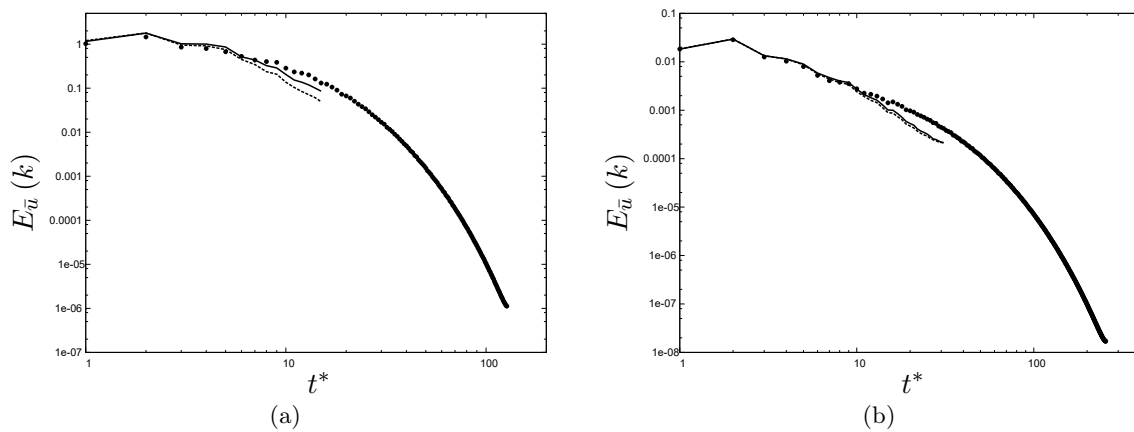


FIGURE 5.25 – Spectre de l'énergie cinétique des champs de vitesse pour les SGE avec les modèles sous-maille *ACLNM* (—), *DSM* (-----) et la SGE filtrée (• •) pour les résolutions de 32^3 points à $Re_\lambda = 90$ (a) et 64^3 points à $Re_\lambda = 160$ (b).

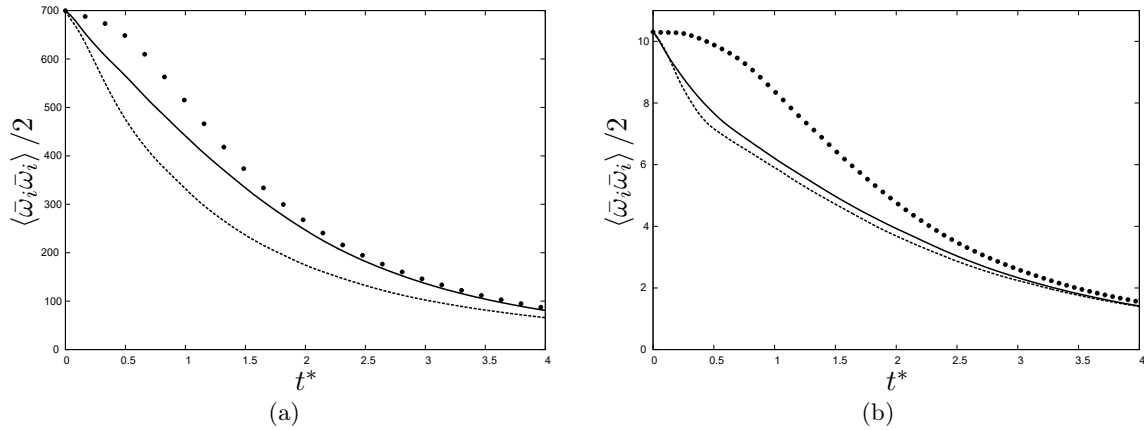


FIGURE 5.26 – Evolution de l’enstrophie résolue du champ de vorticit  en SGE avec les mod les sous-maille *ACLMN* (—) *DSM* (-----) et la *SND* filtr e (• •) pour les r solutions de 32^3 points   $Re_\lambda = 90$ (a) et 64^3 points   $Re_\lambda = 160$ (b).

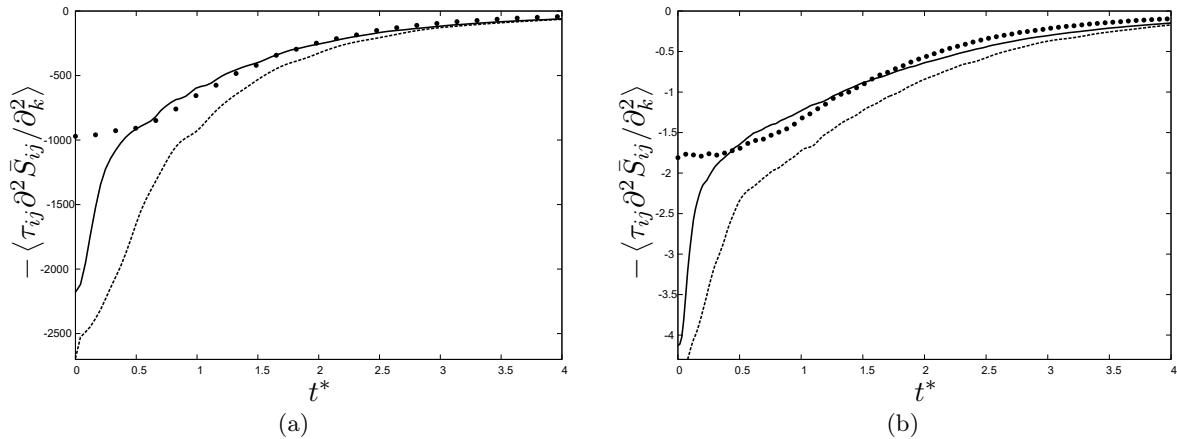


FIGURE 5.27 – Evolution de la dissipation sous-maille de l’enstrophie des mod les sous-maille *ACLMN* (—) *DSM* (-----) et la *SND* filtr e (• •) pour les r solutions de 32^3 points   $Re_\lambda = 90$ (a) et 64^3 points   $Re_\lambda = 160$ (b).

Conclusions

La transposition des coefficients adaptatifs au mod le propos  par Lund & Novikov [55] montre que cette proc dure est applicable au tenseur sous-maille pour l’ quation de quantit  de mouvement filtr e. Malgr  les efforts employ s pour assurer la qualit  de l’apprentissage du r seau, la solution retenue n’apporte pas une am lioration nette par rapport au *DSM* si on se r f re   l’am lioration apport e par *ACWM* par rapport au *DEDM*. Deux causes peuvent  tre identifi es pour ce probl me :

- La topologie du r seau (5.24) donne un nombre de degr s de libert  important   l’espace des param tres ce qui accro t la difficult  de convergence de l’algorithme g n tique car le nombre de combinaison des param tres est vaste⁹. Le choix d’un grand nombre de param tres a  t  guid  par la volont  d’augmenter la qualit  de repr sentation du mod le substitut.
- La solution retenue se trouve sur un bord du front de Pareto global de la base d’entra nement. Par cons quent,   ce stade de convergence de l’algorithme d’optimisation, il est possible que les objectifs ne soient pas pertinents sur ce probl me. Il a  t  montr  qu’il fallait faire un effort important sur le deuxi me objectif car il ne discerne pas les individus engendrant des mod les sur

9. Si les l param tres sont discr tiss s en n valeurs, alors le nombre de combinaisons   explorer est de l^n . Soit en prenant $n = 10$, environ 10^{20} dans le cas de l’*ACLMN*.

ou sous dissipatifs. De plus, il faudrait envisager de prendre en compte la dissipation d'entrophie sous-maille du modèle afin de mieux contrôler ses transferts énergétiques. Le deuxième test *a posteriori* à $Re_\lambda = 160$ montre que l'évolution de la dissipation sous-maille du modèle *ACLNM* actuel est presque similaire à celle du *DSM*.

Cette procédure de calcul de coefficients cependant apporte une alternative au calcul proposé par Lund & Novikov [55]. Dans leurs travaux, ces auteurs étudient deux modèles qui ne prennent pas simultanément en compte tous les termes de la décomposition et la variation spatiale des coefficients. Les auteurs montrent la forte variabilité spatiale des coefficients en indiquant que dans le cas d'un modèle à 5 coefficients, le rapport entre l'écart type et la moyenne de chacun d'eux devrait varier de 100 à 500. Par contre il ne propose pas de modèles permettant ce type de variabilité. Par conséquent, la procédure adaptative des coefficients constitue un léger progrès car nous observons une légère variabilité des rapports allant de 10^{-2} à 1 dans les SGE (figure 5.28).

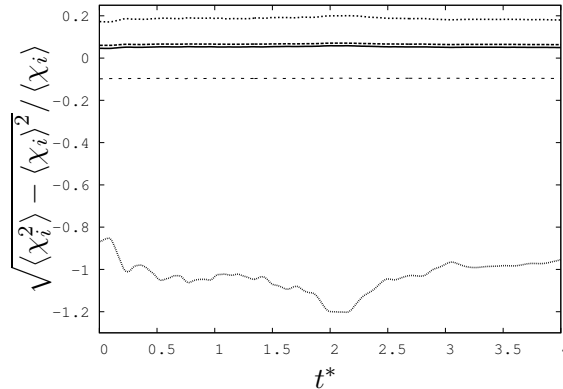


FIGURE 5.28 – Evolution des rapports des écarts types et des moyennes des coefficients calculés par la méthode adaptative pour *ACLNM* dans la SGE $\Delta/\Delta = 8$ pour $Re_\lambda = 90$. χ_4 (.....), χ_3 (-----), χ_2 (—), χ_1 (- - -) et χ_5 (.....)

Le coefficient χ_5 a la plus grande variabilité spatiale et il est négatif en moyenne. On observe également que le coefficient du monôme représentant le modèle de type Smagorinsky est négatif comme dans sa formulation classique ce qui renforce l'idée que les 4 termes supplémentaires de *ACLNM* par rapport au *DSM* sont des termes correctifs de ce dernier.

5.3 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons utilisé une démarche systématique conduisant à la construction de modèles sous-maille de type structuraux avec des aptitudes fonctionnelles. Cette démarche se compose de 4 étapes :

1. **Décomposition polynomiale complète et irréductible des termes à modéliser.** Les décompositions de Noll (5.1) et Spencer & Rilvin (5.20) ont été appliquées respectivement au vecteur sous-maille $\tau_i = \overline{\theta u_i} - \bar{\theta} \bar{u}_i$ et au tenseur sous-maille $\tau_{ij} = \overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j$.
2. **Choix des termes formant les monômes de la décomposition.** Les choix des termes suggérés par Wang *et al.* pour *ACWM* et de Lund & Novikov pour *ACLNM* ont été suivis pour construire les décompositions polynomiales des termes sous-maille des expressions (5.6) et (5.21). Les coefficients f_i et χ_i des monômes de chaque expression sont fonctions des invariants principaux des termes formant les décompositions.
3. **Mise en place d'une fonction de substitution.** Pour définir complètement les expressions des modèles sous-maille, des réseaux de neurones sont construits pour exprimer les coefficients en fonction des invariants principaux (5.8) et (5.21). Leur forme fonctionnelle est définie par la topologie choisie. Cette forme fonctionnelle dépend encore de paramètres à fixer.

4. **Apprentissage supervisé de la fonction de substitution via l'émulation des termes exacts.** Les réseaux de neurones sont entraînés suivant le schéma défini dans la figure 5.1. Ce schéma décrit un algorithme au cours duquel les derniers paramètres à fixer sont adaptés pour optimiser des objectifs reflétant les performances structurelles et fonctionnelles des modèles sous-maille pour plusieurs niveaux de résolution.

Les modèles *ACWM* et *ACLNM* ont deux caractéristiques principales :

- performance structurelle accrue par rapport aux modèles algébriques classiques comme celui du type de Smagorinsky dynamique
- universalité augmentée par rapport à un modèle sous-maille s'appuyant seulement sur un réseau de neurones comme *ANNM*.

Les performances trouvent leurs origines à différents niveaux. Dans l'ordre hiérarchique de construction des modèles, les décompositions polynomiales interviennent en premier. Les monômes ont pour rôle de projeter efficacement les composantes sous-maille exactes sur des bases orthogonales. Cette opération a pour conséquence d'offrir une bonne performance structurelle et incidemment une bonne performance fonctionnelle à la partie algébrique du modèle. Ensuite, le réseau de neurones fournit une forme fonctionnelle pour calculer les coefficients des termes de projection en fonction d'invariants tensoriels. Le caractère fini du nombre de degrés de liberté de ces fonctionnelles est un frein aux performances du modèle. Pour pallier à cette limitation, l'optimisation bi-objectifs améliore les performances structurelles et fonctionnelles simultanément pour s'assurer d'obtenir un modèle performant au niveau de ses prédictions et stable pour les simulations. Les surfaces de compromis obtenues à l'issue de ces optimisations attestent de l'intérêt d'effectuer des optimisations multiobjectifs. Les objectifs sont antagonistes à cause des tailles limitées des topologies des réseaux choisis. Enfin, la sélection des réseaux de neurones "post-optimisation" permet de privilégier ceux qui engendrent de "bons" modèles au sens de nos objectifs, *i.e.* des modèles stables et à haute performance structurelle.

Chapitre 6

Conclusions et perspectives

Le travail présenté dans ce mémoire a permis d'évaluer de nouvelles approches de développement de modèles sous-maille. Ainsi, cinq nouveaux modèles sous-maille ont été proposés : 3 pour le scalaire ($DRGM^s$, $ANNM$ et $ACWM$) et 2 pour la vitesse ($DRGM^v$ et $ACLNM$). Parmi ces modèles, la famille des modèles $DRGM$ rassemble des modèles sous-maille classiques dans le sens où ils sont exprimés par des formes algébriques simples. Ils sont donc implémentables dans des codes de calcul dédiés à la SGE comme cela a été montré avec YALES2. Les autres modèles ($ANNM$, $ACWM$ et $ACLNM$) sont des modèles basés sur des réseaux de neurones qui nécessitent des phases d'apprentissage. De plus, leurs expressions algébriques finales sont complexes. Pour cette raison, ils ne constituent pas des modèles classiques qui peuvent être utilisés en l'état. Néanmoins ils constituent une preuve de la validité des procédures mises en place pour les développer.

Ces modèles sont le résultat de l'application des concepts et méthodologies innovantes qui ont été présentés dans le chapitre 2. Il s'agit ainsi de baser le développement des modèles sur des tests *a priori* pour évaluer leurs performances fonctionnelles et structurelles. Dans cette optique, l'estimateur optimal permet d'affiner les diagnostics de la performance structurelle des modèles, de les faire évoluer, voire de directement s'y substituer. Les réseaux de neurones et l'optimisation multiobjectifs viennent compléter les outils de développement.

La comparaison des performances structurelles et fonctionnelles a permis d'évaluer les modèles classiques des familles DSM et GM par rapport aux modèles développés tout au long de ce travail. L'évaluation de ces performances a également été directement utilisée pour développer les modèles à apprentissage supervisé $ANNM$, $ACWM$ et $ACLNM$. Dans ce contexte, $ANNM$ s'appuie sur la performance structurelle seule, alors que les modèles hybrides $ACWM$ et $ACLNM$ se basent sur la dualité des performances structurelles et fonctionnelles.

La théorie d'estimation optimale enrichit l'évaluation de la performance structurelle en fournissant une décomposition de l'erreur quadratique qui mesure cette performance. Cette décomposition fait apparaître l'estimateur le concept d'estimateur optimal et permet de poser un diagnostic sur les modèles sous-maille afin d'identifier des voies d'améliorations. La première voie d'amélioration est une évolution du jeu de variables sur lequel le modèle repose. Cette utilisation a été conduite dans le chapitre 3, où le développement de la famille des modèles $DRGM$ a été proposée. C'est également cette stratégie qui a été suivie pour sélectionner les variables dans le chapitre 4, où le modèle $ANNM$ a été construit. La seconde voie d'amélioration est une évolution de la forme fonctionnelle. Le calcul potentiel d'amélioration de certains modèles a encouragé la recherche des coefficients dynamiques pour la famille $DRGM$ (pour diminuer l'erreur de forme fonctionnelle). C'est également ce qui a motivé l'utilisation de l'estimateur optimal directement comme modèle sous-maille dans le chapitre de développement de $ANNM$ (pour tenter d'annuler l'erreur de forme fonctionnelle). Les modèles à base de réseaux de neurones ont permis de développer un modèle substitut performant de l'estimateur optimal qui a été utilisé dans le chapitre de développement de $ANNM$. Les réseaux de neurones ont également servi de base pour construire des procédures de calcul de coefficients dynamiques. L'apprentissage de ces réseaux a alors été couplé avec une méthode d'apprentissage multiobjectifs. Cette méthode a permis de développer

dans le chapitre 5 les modèles *ACWM* et *ACLNM* en optimisant à la fois leurs performances structurelles et fonctionnelles.

Les modèles développés dans ce mémoire sont tous des modèles **structuraux** et ils peuvent être classés selon le schéma de la figure 6.1. Sur ce schéma, les modèles se distinguent selon leurs critères de forme fonctionnelle (algébrique/hybride/substitut) et de leurs capacités de généralisation à différentes variétés de configurations d'écoulement (spécialisé/universel).

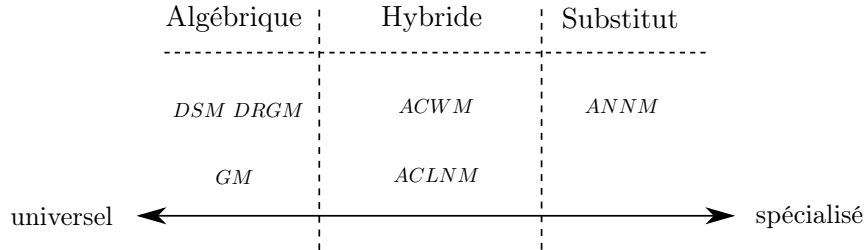


FIGURE 6.1 – Schéma de représentation globale des modèles sous-maille de ce mémoire. Les axes de performance et de généralisation des modèles sont à prendre en guise de tendance.

Ce schéma synthétique permet de donner une vue d'ensemble du positionnement relatif des modèles développés et nous servira de point de référence pour tirer les conclusions relatives à ces différents modèles.

Les modèles algébriques *DSM*, *DRGM* et *GM*

Les modèles algébriques sont ceux de la famille *DRGM* développés dans le chapitre 3. Le modèle structural du gradient est le point de départ de leur développement. La régularisation du tenseur des gradients des vitesses filtrées permet de séparer les termes à l'origine du "backscatter" dans le modèle du gradient. Ensuite, le diagnostic de la performance structurelle via les concepts d'erreur irréductible permet d'extraire le jeu de variables final. Enfin le choix d'une procédure dynamique performante est vérifiée par la comparaison des erreurs irréductibles et des erreurs quadratiques des nouveaux modèles. Dans le cas du *DRGM^s*¹, ce protocole de développement fut assez immédiat. Les tests *a posteriori* ont montré d'excellentes améliorations par rapport aux modèles classiques, à savoir une meilleure prédiction de la variance scalaire et une meilleure prédiction des niveaux d'énergie des petites échelles résolues. La correction du transfert inverse d'énergie des *DRGM* a supprimé les valeurs non physiques de scalaire qui étaient observées sur les fonctions de densité de probabilité du *GM*. Le modèle *DRGM^s* conduit également à une bonne prédiction de la transition vers la turbulence comme nous avons pu l'observer dans les SGE du jet temporel. Dans le cas du *DRGM^v*, le développement est plus délicat puisque le modèle final ne se distingue pas nettement du *GM^v* sur la performance structurelle. Pendant son développement, nous avons également investigué un modèle opérant une combinaison linéaire des deux seuls termes de la régularisation qui ne font pas de transfert d'énergie inverse. Une procédure de calcul à double coefficients a été tentée et a abouti au *MRGM*. Ce modèle n'a pas été retenu à cause de sa performance fonctionnelle légèrement inférieure au *DRGM^v* sur la dissipation sous-maille et à cause de sa complexité algébrique légèrement supérieure au modèle à coefficient dynamique unique. Néanmoins, il a été montré qu'*a priori* le *MRGM* avait une meilleure performance structurelle que celle de l'estimateur optimal du modèle *GM^v* ce qui laisse des possibilités d'amélioration à explorer. De la même façon, le *DRGM^s* peut être dérivé en modèle à deux termes donc deux coefficients dynamiques. Cela aura pour effet d'augmenter le potentiel d'amélioration structurelle du modèle ce qui signifie qu'en mettant en place une procédure dynamique efficace, sa performance structurelle pourrait être meilleure que celle du *DRGM^s* actuel sans affecter sa bonne performance fonctionnelle. Ce point est une piste d'amélioration du modèle qui reste à explorer. Les modèles *DRGM* peuvent être vus comme des modèles étendant l'hypothèse de Boussinesq avec une viscosité sous-maille tensorielle. Cette extension

1. l'exposant "s" se réfère au modèle pour le scalaire, alors que l'exposant "v" se réfère au modèle pour la vitesse

est nécessaire puisque dans les cas du scalaire et de la vitesse, les termes sous-maille ne sont pas alignés avec les composantes du gradient de scalaire résolu et les composantes des vecteurs propres du tenseur des déformations filtrées, respectivement. Ces nouveaux modèles sont de forme fonctionnelle algébrique simple et les tests *a posteriori* auxquels ils sont appliqués démontrent l'amélioration des performances et leur capacité de généralisation (turbulence pleinement développée, transition vers la turbulence, écoulements cisailés libres et turbulence de paroi) ce qui les rend donc **universels**.

Les modèles hybrides

Les modèles hybrides sont les modèles *ACWM* et *ACLNM* présentés dans le chapitre 5. Ils sont dits hybrides car ils s'appuient sur une expression algébrique issue des décompositions vectorielles et tensorielles des expressions des termes sous-maille du scalaire et de la vitesse et sur des réseaux de neurones servant à construire les expressions des coefficients dynamiques. Ces décompositions confèrent à ces deux modèles des aptitudes structurelles à l'instar des modèles du gradient. Comme il a été vu, ces décompositions ont été utilisées par le passé dans les modèles *DNTDM* de Wang *et al.* [96] et de Lund & Novikov [55]. La mise en oeuvre pratique de ces deux modèles de la littérature se heurte à la détermination d'un grand nombre de coefficients dynamiques. Dans notre travail, les réseaux de neurones permettent un calcul dynamique des coefficients avec une prise en compte de tous les termes des décompositions sans hypothèse préalable. De plus, cette méthode de calcul des coefficients dynamiques est une nouvelle approche qui ne se base plus sur l'hypothèse de similarité d'échelle avec l'emploi d'un filtre test de longueur de coupure de taille supérieure à la taille de coupure du filtre de la SGE. La procédure d'apprentissage des réseaux de neurones se base sur l'optimisation bi-objectifs des performances (structurelles et fonctionnelles) des modèles afin d'ajuster les paramètres des réseaux. Afin d'extraire les réseaux pertinents, nous avons réalisé l'intersection des paramètres des réseaux de neurones se trouvant dans l'ensemble de Pareto des objectifs calculés sur la base de données d'entraînement et dans le front de Pareto de ces mêmes objectifs calculés sur une base de données similaire mais spatialement décorrélée. Cette technique a permis de sélectionner les paramètres de réseau de neurones engendrant les modèles les plus universels possible. Cependant, nous avons montré que les capacités de généralisation de ces modèles étaient modérées et qu'elles se limitaient à des configurations d'écoulements assez similaires à celles des bases de données d'entraînement et de test. Enfin une approche intéressante de la méthode de développement et qui n'a pas été explorée, est la possibilité de paramétrer les modèles sous-maille en fonction de leur performance. Cette approche serait intéressante pour définir les meilleurs compromis de performance à faire pour fournir un modèle numériquement stable par exemple. L'optimisation bi-objectifs est une approche intéressante à ce niveau-là du développement d'un modèle. Cependant on peut supposer que le développement d'un modèle sous-maille universel se basant sur cette technique n'aurait en fait pas vraiment besoin d'une optimisation bi-objectifs de ses performances. Dans le cas idéal, en effet, ces performances structurelles et fonctionnelles ne devraient pas être antagonistes dans la mesure où la forme fonctionnelle adoptée devrait être suffisamment complexe pour décrire avec fidélité la physique de la turbulence sous-maille. Par conséquent, la contrainte locale de performance structurelle pourrait être satisfaite de façon simultanée à la contrainte globale de performance fonctionnelle. Dans le cas des réseaux de neurones, cela impliquerait la construction de topologies de réseaux encore plus complexes menant à des niveaux de degrés de non-linéarité encore plus élevés.

Les modèles substitués

Le dernier modèle de ce mémoire, *ANNM* est qualifié de modèle substitut car il s'appuie uniquement sur un réseau de neurones qui est exclusivement entraîné sur la performance structurelle. Lorsque l'objectif est d'utiliser l'estimateur optimal directement en modèle sous-maille, la question du choix des variables qui est totalement libre se pose. Le développement du modèle sous-maille idéal selon Langford & Moser inciterait à prendre toutes les variables de tous les points du domaine comme variables de conditionnement. Puisque cette solution est techniquement délicate à réaliser, nous nous sommes posés la question de la recherche du jeu de variables le plus performant et compact possible tout en nous limitant aux seules variables du point courant de l'espace où le modèle sera calculé.

A partir des travaux de Wang *et al.* [96], nous nous sommes penchés sur la décomposition de Noll [67] dite complète et irréductible d'après Zheng [102]. L'estimateur optimal a été sollicité pour évaluer les termes générant le jeu de variables le plus performant structurellement. Ensuite le réseau de neurones se substituant à l'estimateur optimal a été mis en oeuvre. Le modèle *ANNM* issu de ce développement génère la meilleure performance structurelle rencontrée dans tout le mémoire. Cette performance structurelle s'accompagne d'une performance fonctionnelle correcte sur plusieurs tailles de filtre. Néanmoins, les tests *a posteriori* de ce modèle montrent qu'il ne s'étend pas à des configurations d'écoulements différentes de celle utilisée pour entraîner son réseau de neurones. Par conséquent, ce type de développement mène à un modèle peu généralisable et qui peut être qualifié de très **spécialisé**.

En définitive, les modèles algébriques développés (*DRGM*) fournissent une modélisation physique des termes sous-maille satisfaisante au regard des simulations stables et des bonnes prédictions des statistiques des champs modélisés. Ces modèles pourraient bénéficier d'améliorations structurelles au prix d'une procédure dynamique à double coefficients comme suggéré par le *MRGM*.

Comme évoqué en début de conclusion, les modèles hybrides et le modèle substitut ne sont pas directement utilisables comme des modèles conventionnels puisque nos travaux ont montré que leur degré de généralité restait finalement assez limité en dépit de nos efforts pour leur assurer un maximum d'universalité. L'apport des présents travaux nous semble avoir concrétisé l'utilisation de tels réseaux de neurones dans une stratégie systématique de développement de modèles sous-maille, en lien avec le concept d'estimateur optimal. Les perspectives d'utilisation de modèles à base de réseaux de neurones supposent d'aller au-delà de la mise en oeuvre d'un code spectral pour une THI et d'étudier la faisabilité de leur mise en oeuvre dans des codes de calcul avec des configurations réelles afin de voir comment la procédure de développement doit évoluer pour prendre en compte l'erreur numérique supplémentaire.

Ensuite, la technique du modèle substitut pourrait être appliquée à des campagnes de simulations d'écoulements où les configurations sont peu éloignées les unes des autres comme dans un problème d'optimisation de forme par exemple. Dans cette campagne, une simulation avec une très grande part d'énergie totale résolue pourrait servir de base de données d'entraînement au modèle substitut. Les calculs CFD des objectifs de l'optimisation seraient effectués sur des maillages plus grossiers avec le modèle substitut comme modèle sous-maille.

Dans le même ordre d'idées, les problématiques de quantification d'incertitudes par méthodes non-intrusives font également appel à des séries de calculs sur des configurations qui peuvent rester assez voisines les unes des autres dans le but de calculer moyenne et variance de grandeurs d'intérêt en présence de variables incertaines. Là-encore, les modèles hybrides et substitut pourraient être mis en oeuvre, d'une façon compatible avec leur degré de généralité limité.

Une autre marge de manoeuvre pour les modèles hybrides est de travailler sur la topologie des réseaux et sur la stratégie d'entraînement. L'entraînement devra être tourné vers la performance structurelle comme objectif avec des contraintes sur les performances fonctionnelles. De plus, il serait plus efficace de calculer une performance structurelle sur plusieurs bases de données simultanément. Les développements sur les modèles hybrides et substitut, nous conduisent à penser que la performance structurelle est primordiale pour les modèles sous-maille. Cette performance doit être associée à des performances fonctionnelles à tendance sur-dissipative. Il semble finalement plus naturel de fonctionnaliser un modèle structurel que de structuraliser un modèle fonctionnel. L'exemple du *DRGM* montre la fonctionnalisation du modèle structurel du gradient. Mais le *DRGM* peut également être vu comme un modèle fonctionnel à viscosité sous-maille tensorielle. Cependant dans ce cas, la partie $C_d \mathbf{S}^\ominus$ du modèle ainsi que les perspectives d'évolution à double coefficients dynamiques auraient été moins immédiates. Les modèles structurels semblent constituer une base à privilégier pour le développement de futurs modèles sous-maille.

Annexe A

Discussion sur des coefficients dynamiques du modèle régularisé à un coefficient pour la vitesse

Dans cette annexe sont exposées les pistes de calcul des coefficients dynamique C_d envisagées pour construire un modèle du gradient régularisé performant pour la vitesse de la forme :

$$\tau_{ij}^{RGM1} = C_d \bar{\Delta}^2 \bar{S}_{ik}^\ominus \bar{S}_{jk} \quad (\text{A.1})$$

Chronologiquement, trois formulations différentes de coefficients dynamique ont été testées pour le $RGM1$ de la relation (A.1) :

1. la procédure classique de Germano *et al.* [33] modifiée par Lilly [51].
2. la procédure s'appuyant sur le développement de Taylor des quantités filtrées proposée par Fabre & Balarac [29] et dédiée au modèle du gradient. Cette procédure est utilisée avec succès dans le $DRGM$ scalaire à l'équation (3.18).
3. la procédure de You & Moin [97] appliquée au modèle Sigma de Nicoud *et al.* [65].

Ces trois formulations sont comparées via des tests *a priori* sur des critères de performance fonctionnelle du modèle $RGM1$ de la relation (A.1).

Définition des procédures

Procédure de Germano *et al.* et Lilly pour le RGM vitesse

La procédure de Germano *et al.* [32] avec la procédure des moindres carrés de Lilly [51] :

$$C_{GL} = \frac{\langle L_{ij} P_{ij} \rangle}{\langle P_{ij} P_{ij} \rangle} \quad \text{avec} \quad P_{ij} = \hat{\Delta}^2 \hat{S}_{ik}^\ominus \hat{S}_{jk} - \bar{\Delta}^2 \widehat{\bar{S}_{ik}^\ominus \bar{S}_{jk}}. \quad (\text{A.2})$$

et \mathbf{L} défini comme dans (1.52).

Procédure de Fabre & Balarac

Cette procédure suit la même démarche que celle du $DRGM^s$ aboutissant à la relation (3.17). A partir de l'équation (3.16) et en remplaçant $f = \bar{u}_i$ et $g = \bar{u}_j$:

$$\widehat{\bar{u}_i \bar{u}_j} = \hat{u}_i \hat{u}_j + \frac{\hat{\Delta}^2}{12} \frac{\partial \hat{u}_i}{\partial x_k} \frac{\partial \hat{u}_j}{\partial x_k} + O(\hat{\Delta}^4). \quad (\text{A.3})$$

L'application de la décomposition de l'équation (3.22) en ne gardant que le terme de l'équation (3.33), donne une relation entre le tenseur de Leonard et le nouveau modèle au niveau de l'échelle du filtre

test $\hat{\cdot}$:

$$\widehat{\bar{u}_i \bar{u}_j} - \hat{u}_i \hat{u}_j = C_F \hat{\Delta}^2 \hat{S}_{ik}^{\ominus} \hat{S}_{jk} + (\hat{\Delta}^4). \quad (\text{A.4})$$

Dans cette relation, les termes d'ordre supérieurs à $O(\hat{\Delta}^2)$ sont négligés et le coefficient est supposé constant en espace. Ainsi, l'application de la procédure des moindres carrés de Lilly [51] conduit à :

$$C_F = \frac{\langle L_{ij} N_{ij} \rangle}{\langle N_{ij} N_{ij} \rangle} \quad \text{avec} \quad N_{ij} = \hat{\Delta}^2 \hat{S}_{ik}^{\ominus} \hat{S}_{jk}. \quad (\text{A.5})$$

Procédure de You & Moin

La méthode de calcul de constante dynamique proposée par You & Moin [97] est basée sur l'équilibre global de transfert d'énergie. L'idée originale de ce développement est d'écrire l'équation d'évolution de $L_{ii} = \widehat{\bar{u}_i \bar{u}_i} - \hat{u}_i \hat{u}_i$ dont chacun des deux termes sera construit en partant de l'équation de quantité de mouvement (1.1). You & Moin [97] construisent le terme $\hat{u}_i \hat{u}_i$ en filtrant l'équation de QDM (1.1) directement par la combinaison des filtres $\hat{\cdot}$ puis en la multipliant par $2\hat{u}_i$, ainsi ils obtiennent,

$$\frac{\partial \hat{u}_i \hat{u}_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(-2\hat{u}_j \hat{p} / \rho - \hat{u}_j \hat{u}_i \hat{u}_i + \nu \frac{\partial \hat{u}_i \hat{u}_i}{\partial x_j} - 2\hat{u}_i Q_{ij} \right) - 2\nu \frac{\partial \hat{u}_i}{\partial x_j} \frac{\partial \hat{u}_i}{\partial x_j} + 2Q_{ij} \hat{S}_{ij}, \quad (\text{A.6})$$

ce qui fait apparaître le terme $Q_{ij} = \widehat{\bar{u}_i \bar{u}_j} - \hat{u}_i \hat{u}_j$ qui n'est pas accessible dans une SGE. Nous proposons d'obtenir cette même équation en filtrant (1.1) en deux étapes. Le premier filtrage $\bar{\cdot}$ fait apparaître τ_{ij} et le second filtrage par $\hat{\cdot}$ fait apparaître les termes L_{ij} et $\hat{\tau}_{ij}$. La multiplication de cette dernière équation par $2\hat{u}_i$ donne :

$$\frac{\partial \hat{u}_i \hat{u}_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(-2\hat{u}_j \hat{p} / \rho - \hat{u}_j \hat{u}_i \hat{u}_i + \nu \frac{\partial \hat{u}_i \hat{u}_i}{\partial x_j} - 2\hat{u}_i \hat{\tau}_{ij} - 2\hat{u}_i L_{ij} \right) - 2\nu \frac{\partial \hat{u}_i}{\partial x_j} \frac{\partial \hat{u}_i}{\partial x_j} + 2\hat{\tau}_{ij} \hat{S}_{ij} + 2L_{ij} \hat{S}_{ij}. \quad (\text{A.7})$$

Dans cette équation, il apparaît deux tenseurs accessibles en SGE : $\hat{\tau}_{ij}$ et le tenseur de Leonard L_{ij} . En identifiant terme à terme les deux équations (A.6) et (A.7), on obtient l'égalité

$$Q_{ij} \hat{S}_{ij} = \hat{\tau}_{ij} \hat{S}_{ij} + L_{ij} \hat{S}_{ij} + \frac{\partial}{\partial x_j} (-2\hat{u}_i \hat{\tau}_{ij} - 2\hat{u}_i L_{ij} + 2\hat{u}_i Q_{ij}). \quad (\text{A.8})$$

Il reste à construire la partie $\widehat{\bar{u}_i \bar{u}_j}$ de L_{ij} qui est obtenue en filtrant l'équation d'énergie cinétique résolue (1.47) avec $\hat{\cdot}$

$$\frac{\partial \widehat{\bar{u}_i \bar{u}_i}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(-2\widehat{\bar{u}_j \bar{p}} / \rho - \widehat{\bar{u}_j \bar{u}_i \bar{u}_i} + \nu \frac{\partial \widehat{\bar{u}_i \bar{u}_i}}{\partial x_j} - 2\widehat{\bar{u}_i \tau_{ij}} - \widehat{\bar{u}_i \bar{u}_i \bar{u}_j} + \widehat{\bar{u}_j \bar{u}_i \bar{u}_i} \right) - 2\nu \frac{\partial \widehat{\bar{u}_i}}{\partial x_j} \frac{\partial \widehat{\bar{u}_i}}{\partial x_j} + 2\widehat{\tau_{ij} \bar{S}_{ij}} \quad (\text{A.9})$$

En retranchant les équations (A.9) et (A.7), l'équation d'évolution de la trace du tenseur de Leonard est obtenue :

$$\begin{aligned} \frac{\partial L_{ii}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(-\frac{2}{\rho} (\widehat{\bar{u}_j \bar{p}} - \hat{u}_j \hat{p}) - (\widehat{\bar{u}_i \bar{u}_i \bar{u}_j} - \hat{u}_j \hat{u}_i \hat{u}_i) + \nu \left(\frac{\partial \widehat{\bar{u}_i \bar{u}_i}}{\partial x_j} - \frac{\partial \hat{u}_i \hat{u}_i}{\partial x_j} \right) - 2\widehat{\bar{u}_i \tau_{ij}} + 2\hat{u}_i \hat{\tau}_{ij} + 2\hat{u}_i L_{ij} \right) \\ - 2\nu \left(\frac{\partial \widehat{\bar{u}_i}}{\partial x_j} \frac{\partial \widehat{\bar{u}_i}}{\partial x_j} - \frac{\partial \hat{u}_i}{\partial x_j} \frac{\partial \hat{u}_i}{\partial x_j} \right) + 2\widehat{\tau_{ij} \bar{S}_{ij}} - 2\hat{\tau}_{ij} \hat{S}_{ij} - 2L_{ij} \hat{S}_{ij}. \quad (\text{A.10}) \end{aligned}$$

You & Moin [97] font l'hypothèse de négliger la variation temporelle de cette trace. La moyenne spatiale de l'équation (A.10) fait s'annuler les termes de diffusion¹ et donne l'équation d'équilibre global de

1. Théorème d'analyse vectorielle de Green-Ostrogradsky appliqué au volume de contrôle de l'écoulement, délimité par des frontières périodiques dans notre cas

l'énergie :

$$0 = -\nu \left\langle \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \hat{u}_i}{\partial x_j} \frac{\partial \hat{u}_i}{\partial x_j} \right\rangle + \left\langle \widehat{\tau_{ij} \bar{S}_{ij}} \right\rangle - \left\langle \hat{\tau}_{ij} \hat{S}_{ij} \right\rangle - \left\langle L_{ij} \hat{S}_{ij} \right\rangle. \quad (\text{A.11})$$

En remplaçant τ_{ij} par l'expression du *RGM1* de la relation (A.1) et en renommant C_d par C_{YM} , l'équation (A.11) devient :

$$C_{YM} = \frac{\left\langle \nu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \hat{u}_i}{\partial x_j} \frac{\partial \hat{u}_i}{\partial x_j} \right) + L_{ij} \hat{S}_{ij} \right\rangle}{\bar{\Delta}^2 \left\langle \bar{S}_{ik}^\ominus \bar{S}_{jk} \bar{S}_{ij} - \bar{S}_{ik}^\ominus \bar{S}_{jk} \hat{S}_{ij} \right\rangle}. \quad (\text{A.12})$$

Après avoir constitué plusieurs procédures de calcul de coefficient dynamique pour la formulation *RGM1*, les valeurs de ces coefficients sont calculées puis comparées *a priori* à un coefficient exact calculé par le biais de la dissipation sous-maille exacte $\langle \tau_{ij} \bar{S}_{ij} \rangle$.

Test *a priori* des performances fonctionnelles des coefficients dynamiques

Les tests *a priori* sont effectués sur une base de données de THIF statistiquement convergée à un nombre de Reynolds basé sur la micro-échelle de Taylor de $Re_\lambda = 160$. Le filtrage explicite des composantes du champ de vitesse est effectué avec un filtre spectral à différentes longueurs de coupure. De cette façon, le coefficient dynamique exact que devrait avoir le modèle *RGM1* est émulé sur cet écoulement via la dissipation sous-maille obtenue par la relation :

$$C_{SND} = \frac{\langle \tau_{ij}^{SND} \bar{S}_{ij} \rangle}{\langle \bar{\Delta}^2 \bar{S}_{ik}^\ominus \bar{S}_{jk} \bar{S}_{ij} \rangle}. \quad (\text{A.13})$$

Comme le dénominateur est strictement négatif, alors ce quotient existe pour toutes les tailles de filtre. De plus, la dissipation sous-maille exacte est en moyenne dans le sens direct [71], donc négative, par conséquent $C_{SND} > 0 \quad \forall \bar{\Delta}/\Delta$. Les coefficients, C_{GL} de l'équation (A.2), C_F de l'équation (A.5), C_{YM} de l'équation (A.12) et C_{SND} de l'équation (A.13) sont représentés sur la figure A.1.

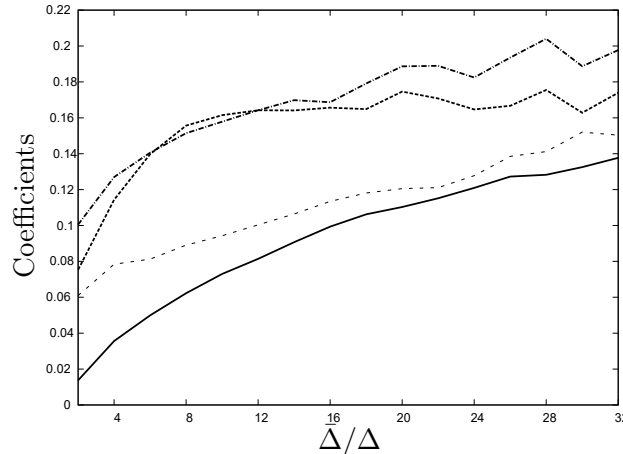


FIGURE A.1 – Evolution des coefficients dynamique C_{GL} (-----), C_F (-----), C_{YM} (- - -), C_{SND} (—) en fonction de la longueur de coupure.

Comme attendu, les coefficients sont strictement positifs, ce qui permet de satisfaire la condition nécessaire au choix du terme \bar{S}^\ominus pour le sens direct de la dissipation sous-maille de l'énergie cinétique. Le coefficient C_{YM} est le plus proche de C_{SND} . Cependant, pour les écoulements canoniques où l'opérateur différentiel du modèle *RGM1* de la relation (A.1) ne s'auto-annule pas (cf. annexe B), le calcul

du coefficient a pour rôle de couper la dissipation du modèle. Or le coefficient C_{YM} est basé sur une hypothèse d'équilibre global. Il est donc conçu seulement pour les modèles s'auto-annulant comme le modèle sigma de Nicoud *et al.* [65]. Cette procédure est donc écartée.

Les coefficients C_F et C_{GL} montrent qu'ils surévaluent le coefficient exact d'environ 200 et 300%. Ils risquent de procurer un niveau de dissipation sous-maille d'énergie cinétique très élevé à leurs modèles respectifs.

D'après ces constatations, le coefficient C_{YM} , à cause des propriétés du RGM1 B, et les coefficients C_{GL} et C_F , à cause de leurs valeurs excessives qui conduiront à une sur-dissipation sous-maille, sont tous écartés. Deux nouveaux coefficients sont adaptés, le premier est dérivé de C_F (A.5)² et le deuxième conserve C_F , mais le champ de vitesse résolu est modifié avant d'être utilisé pour calculer l'opérateur différentiel :

1. La procédure de calcul du coefficient C_F est modifiée pour diminuer sa valeur afin de mieux ajuster le niveau de dissipation sous-maille d'énergie cinétique. Suite à l'utilisation de la procédure de Fabre & Balarac [29], le numérateur et le dénominateur sont réduits par le tenseur des contraintes à l'échelle du filtre test $\hat{\hat{S}}_{ij}$. Cette nouvelle procédure conduit au modèle DRGM finalement utilisé dans le développement du modèle régularisé :

$$\tau_{ij}^{DRGM} = C_{DD} \bar{\Delta}^2 \bar{S}_{ik}^\ominus \bar{S}_{jk} \quad \text{avec} \quad C_{DD} = \frac{\langle L_{ij} \hat{\hat{S}}_{ij} \rangle}{\langle N_{ij} \hat{\hat{S}}_{ij} \rangle}. \quad (\text{A.14})$$

2. La procédure des moindres carrés de Lilly [51] appliquée au coefficient C_F de la relation (A.5) est conservée, par contre, le champ de vitesse servant au calcul du modèle est adapté. Cette technique a été utilisée par Ducros *et al.* [24, 25] dans le modèle sous-maille des fonctions structures. Cette procédure consiste à filtrer par un filtre passe haut en fréquence, le champ de vitesse résolue avant de l'utiliser pour calculer le modèle. Ducros *et al.* [24, 25] utilisaient des filtres Laplaciens ayant un gain d'amplification de signal supérieur à 1 afin de remonter le niveau de transfert d'énergie pour le calcul de la viscosité sous-maille. Ici un filtre complémentaire au filtre spectral avec une longueur de coupure de $\tilde{\Delta} = 2\bar{\Delta}$ est utilisé. Le nouveau champ de vitesse $\tilde{\tilde{\mathbf{u}}}$ s'écrit :

$$\tilde{\tilde{\mathbf{u}}}(\mathbf{k}) = (1 - G(\mathbf{k}, \tilde{\Delta})) \bar{\mathbf{u}}(\mathbf{k}), \quad (\text{A.15})$$

avec G le filtre spectral, \mathbf{k} les vecteurs d'onde et $\tilde{\Delta}$ la longueur de coupure. Ce qui signifie dans l'espace de Fourier que seules les amplitudes associées aux nombres d'ondes compris entre $k_{\tilde{\Delta}}$ et $k_{\bar{\Delta}}$ seront gardées pour le calcul du modèle. Il n'y a pas d'amplification dans ce cas. Ainsi le nouveau modèle noté DFS2RGM, utilisant la procédure dynamique de Fabre & Balarac [29] et un préfiltrage complémentaire au filtre spectral s'écrit :

$$\tau_{ij}^{DFS2RGM} = C_F \bar{\Delta}^2 \tilde{\tilde{S}}_{ik}^\ominus \tilde{\tilde{S}}_{jk}, \quad (\text{A.16})$$

avec $\tilde{\tilde{\mathbf{S}}}$ le tenseur des contraintes calculées avec les champs de vitesse $\tilde{\tilde{\mathbf{u}}}$.

Les tests *a priori* qui vont suivre ont pour but de tester les deux dernières formulations de coefficients dynamiques.

Test *a priori* des modèles régularisés

Pour valider ces modèles, des tests *a priori* ont été effectués sur la base de données SND de $Re_\lambda = 160$. Les performances structurelles et fonctionnelles des modèles DRGM et DFS2RGM sont évalués et comparés aux performances des GM et DSM.

2. procédure développée dans le corps du manuscrit et rappelée ici

Le modèle $DFS2RGM$, nécessite de calculer une nouvelle erreur irréductible car le jeu de variables est modifié par l'étape de préfiltrage. Le jeu de variables associé au $DFS2RGM$ est

$$\phi_i^{DFS2RGM} = \left\{ \bar{\Delta}^2 \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\tilde{S}_{ik}^{\ominus} \tilde{S}_{jk} \right) \right\}. \quad (\text{A.17})$$

avec le filtre $\tilde{\cdot}$ défini par la relation (A.15).

La figure A.2 rassemble les résultats des erreurs quadratiques des modèles GM , DSM , $DRGM$ et $DFS2RGM$ ainsi que leurs erreurs irréductibles associées.

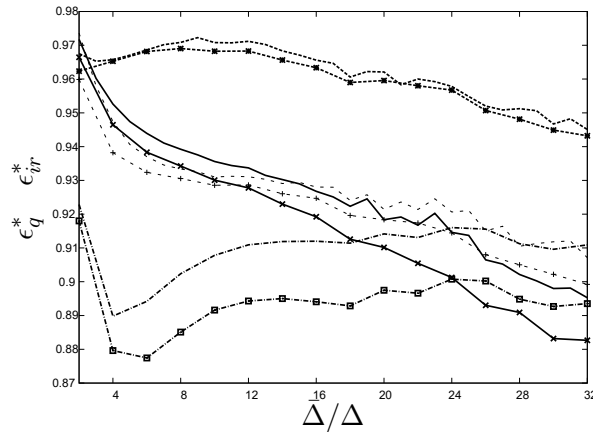


FIGURE A.2 – Erreurs irréductibles ϵ_{ir}^* (symboles) et quadratique ϵ_q^* des modèles $DFS2RGM$ (- - -), GM (- - - -), $DRGM$ (—), et DSM (- - - -) en fonction de la taille de filtre $\bar{\Delta}/\Delta$

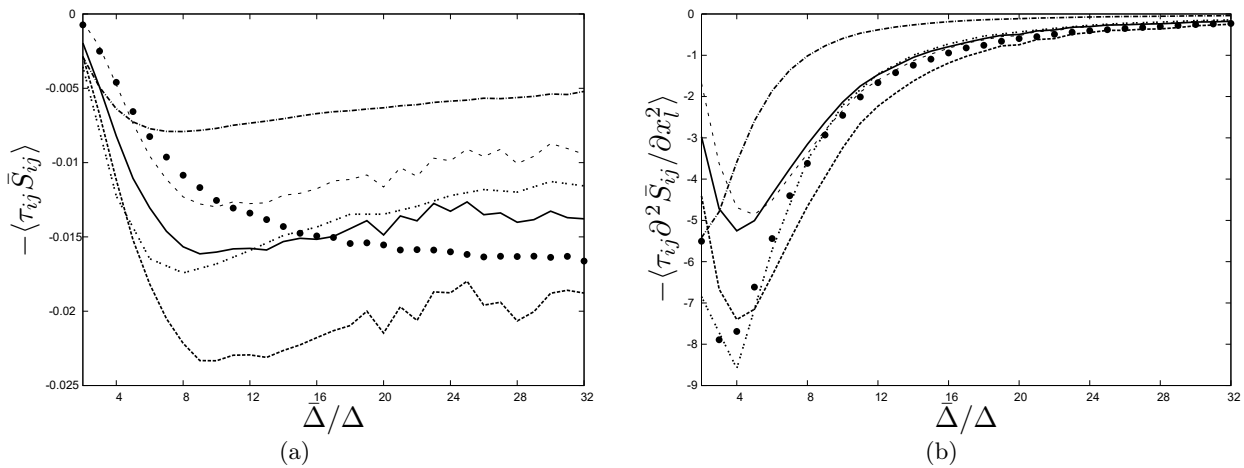


FIGURE A.3 – Dissipations sous-maille d'énergie cinétique (a) et d'entrophie (b) des modèles $DFS2RGM$ (- - -), GM (- - - -), $DRGM$ (—) et DSM (- - - -) en fonction de la taille de filtre. Les transferts exacts de la SND filtrée sont tracés avec (••).

L'erreur irréductible du jeu de variables $\phi_i^{DFS2RGM}$ est meilleure que celle du jeu de variables ϕ_i^{RGM} pour les petites tailles de filtre.

Les procédures de calcul de coefficients dynamiques des modèles $DFS2RGM$ et $DRGM$ sont assez bien adaptées, car leurs erreurs quadratiques sont proches des erreurs irréductibles calculées avec leurs jeux de variables respectifs.

Les niveaux de dissipation sous-maille d'énergie cinétique sont représentés sur la figure A.3(a) et les

dissipations sous-maille d'enstrophie sont représentés sur la figure A.3(b). Les nouveaux modèles se rapprochent des transferts sous-maille exacts de la SND filtrée ce qui leur confère de meilleures performances fonctionnelles que les modèles *DSM* et *GM*. En particulier, le *DRGM* conserve une dissipation sous-maille de l'énergie cinétique plus élevée que le *DFS2RGM* et inversement pour la dissipation sous-maille d'enstrophie où le *DFS2RGM* est légèrement meilleur que le *DRGM*.

Le *DFS2RGM* donne de meilleurs résultats *a priori* que le *DRGM* mais seulement pour les petites tailles de filtre qui sont voisines de la zone de dissipation du spectre de l'énergie cinétique. En se rapprochant de la zone inertielle, le *DRGM* donne de meilleures performances fonctionnelles et structurelles. C'est la raison pour laquelle, le *DRGM* a été sélectionné plutôt que le *DFS2RGM*.

Annexe B

Propriétés de l'opérateur différentiel

L'objectif de cette annexe est de dégager quelques propriétés de l'opérateur différentiel du modèle *DRGM* pour la vitesse.

Il est commun d'écrire qu'un modèle sous-maille pour la vitesse $\boldsymbol{\tau}$ est le produit de trois éléments [65]

$$\boldsymbol{\tau} = C\bar{\Delta}^2 D_{ij}(\bar{\mathbf{u}}) \quad (\text{B.1})$$

avec C un coefficient généralement déterminé dynamiquement, $\bar{\Delta}$ la longueur de coupure du filtre implicite et $D_{ij}(\bar{\mathbf{u}})$ un opérateur vectoriel différentiel, à valeurs tensorielles, homogène à une fréquence. Cet opérateur doit répondre à des propriétés d'invariances propres aux équations de Navier-Stokes. Speziale [89] fut le premier à explorer les propriétés mathématiques des modèles algébriques sous-maille en étudiant leurs invariances dans des repères Galiléens. Il démontre entre autres que le *GM* respecte cette invariance.

Modèle sous-maille défini semi-positif

Vreman *et al.* [93] montrent que le tenseur sous-maille doit être défini positif dans des conditions de filtrage positif. Cela a pour rôle d'assurer une énergie cinétique modélisée positive. Nous pouvons montrer que le *DRGM* est dans ce cas, car ses valeurs propres sont positives ou nulles :

$$\tau_{ij}^{DRGM} / C_d \bar{\Delta}^2 = \sum_{l=1}^3 \underbrace{\min(\lambda^{(l)}, 0)}_{\Lambda^{(l)} \geq 0} \lambda^{(l)} e_i^{(l)} e_j^{(l)}. \quad (\text{B.2})$$

Par conséquent la condition de réalisabilité de Vreman *et al.* [93] se vérifie pour des filtres positifs. Dans ces conditions, le tenseur sous-maille est défini semi-positif.

Comportement du modèle dans les écoulements

Quelques-unes des propriétés auxquelles sont soumises le modèle Sigma de Nicoud *et al.* [65], sont testées sur l'opérateur différentiel du *DRGM*. Les modèles sous maille doivent avoir un comportement asymptotique en $O(y^3)$ avec y la distance normale à la paroi [92]. Cette propriété qui est à l'origine des modèles Sigma de Nicoud *et al.* [65] et WALE de Vreman [92], n'est pas respectée par le modèle *DRGM*.

Les matrices des gradients de la vitesse résolue $g_{ij} = \partial \bar{u}_i / \partial x_j$ représentatives d'écoulements canoniques sont testées sur l'opérateur différentiel du *DRGM*. Les écoulements canoniques retenus sont similaires à ceux étudiés dans Nicoud *et al.* [65] pour le modèle sigma : rotation solide, cisaillement pure, écoulement axisymétrique et isotrope. Dans les directions principales du repère, ces matrices

s'écrivent :

$$g_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}_{rot}, \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}_{cis}, \begin{pmatrix} \pm 2 & 0 & 0 \\ 0 & \pm 1 & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 \end{pmatrix}_{axi}, \begin{pmatrix} \pm 1 & 0 & 0 \\ 0 & \pm 1 & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 \end{pmatrix}_{iso}. \quad (\text{B.3})$$

Le calcul analytique de la dissipation sous-maille d'énergie cinétique $\tau_{ij}^{DRGM} \bar{S}_{ij}$ par le biais d'un logiciel de calcul formel, permet de savoir si l'opérateur différentiel va s'auto-annuler dans ces écoulements canoniques. Les résultats montrent que le modèle *DRGM* s'auto-annule seulement dans le cas de la rotation solide, tout comme l'opérateur différentiel de type Smagorinsky $2(\bar{S}_{ij}\bar{S}_{ij})^{1/2} \bar{S}_{ij}$. Similairement à celui-ci, la procédure dynamique du *DRGM* devra corriger ce comportement.

En conclusion de cette annexe, le *DRGM* :

- vérifie la propriété fondamentale de réalisabilité des modèles sous-maille de Vreman *et al.* [93].
- se comporte comme les modèles de type Smagorinsky dans les écoulements canoniques.

Annexe C

Procédure de calcul de \bar{S}_{ij}^{\ominus}

Le calcul du terme \bar{S}_{ij}^{\ominus} (resp. \bar{S}_{ij}^{\oplus}) revient à diagonaliser \bar{S}_{ij} puis à reconstruire le tenseur avec les valeurs propres négatives (resp. positives).

Valeurs propres

Le processus de diagonalisation s'effectue par le calcul des valeurs propres de \bar{S}_{ij} qui sont les racines du polynôme caractéristique,

$$\det(\lambda \mathbf{I} - \bar{\mathbf{S}}) = 0 \iff a\lambda^3 + b\lambda^2 + c\lambda + d = 0, \quad (\text{C.1})$$

où I est la matrice identité de dimension 3 et les coefficients sont,

$$\begin{aligned} a &= 1 & b &= -\text{tr}(\bar{\mathbf{S}}) = 0 \\ c &= -\frac{1}{2}(\text{tr}(\bar{\mathbf{S}}^2) - \text{tr}(\bar{\mathbf{S}})^2) & d &= -\det(\bar{\mathbf{S}}). \end{aligned}$$

Où

$$\begin{aligned} c &= -\frac{1}{2}(\bar{S}_{11}^2 + \bar{S}_{22}^2 + \bar{S}_{33}^2 + 2(\bar{S}_{12}^2 + \bar{S}_{23}^2 + \bar{S}_{13}^2)) \\ d &= \bar{S}_{13}^2 \bar{S}_{22} + \bar{S}_{12}^2 \bar{S}_{33} + \bar{S}_{23}^2 \bar{S}_{11} - \bar{S}_{11} \bar{S}_{22} \bar{S}_{33} - 2\bar{S}_{12} \bar{S}_{23} \bar{S}_{13} \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

Les racines d'un polynôme du troisième ordre s'obtiennent par la formule de Cardano. Compte-tenu des simplifications, les valeurs propres s'écrivent :

$$\lambda^{(k)} = 2 \frac{-c}{3} \cos \left(\frac{1}{3} \cos^{-1} \left(\frac{-d}{2} \frac{\sqrt{27}}{-c^3} \right) + \frac{2k\pi}{3} \right). \quad (\text{C.3})$$

Existence

Les trois racines existent toujours car :

$$c = -\frac{\bar{S}_{ij} \bar{S}_{ij}}{2} < 0 \quad (\text{C.4})$$

et

$$\left| \frac{-d}{2} \frac{\sqrt{27}}{-c^3} \right| \leq 1 \iff -\frac{27d^2}{4c^3} \leq 1$$

Cette condition est toujours vérifiée car le calcul des valeurs propres d'une matrice symétrique réelle implique trois valeurs propres réelles donc le discriminant Δ du polynôme caractéristique (C.1) est

positif ou nul d'où :

$$\begin{aligned} \Delta \geq 0 &\iff -4c^3 - 27d^2 \geq 0 \\ &\iff -27d^2 \geq 4c^3 \\ &\iff -\frac{27d^2}{4c^3} \leq 1 \quad \text{car } c < 0 \end{aligned} \tag{C.5}$$

Vecteurs propres

Le calcul des vecteurs propres $\mathbf{X}^{\lambda^{(k)}}$ revient à résoudre le système

$$\bar{\mathbf{S}}\mathbf{X}^{\lambda^{(k)}} = \lambda^{(k)}\mathbf{X}^{\lambda^{(k)}} \iff (\bar{\mathbf{S}} - \mathbf{I}\lambda^{(k)})\mathbf{X}^{\lambda^{(k)}} = 0 \quad \text{avec } \mathbf{X}^{\lambda^{(k)}} = x_i^{\lambda^{(k)}} \tag{C.6}$$

qui devient :

$$\begin{cases} (\bar{S}_{11} - \lambda_k) x_1^{\lambda_k} + \bar{S}_{12} x_2^{\lambda_k} + \bar{S}_{13} x_3^{\lambda_k} = 0 \\ \bar{S}_{12} x_1^{\lambda_k} + (\bar{S}_{22} - \lambda_k) x_2^{\lambda_k} + \bar{S}_{23} x_3^{\lambda_k} = 0 \\ \bar{S}_{13} x_1^{\lambda_k} + \bar{S}_{23} x_2^{\lambda_k} + (\bar{S}_{33} - \lambda_k) x_3^{\lambda_k} = 0 \end{cases} .$$

Bibliographie

- [1] K. Alvelius. Random forcing of three-dimensional homogeneous turbulence. *Phys. Fluids*, 11 :1880–1889, 1999.
- [2] Obukhov A.M. Structure of the temperature field in turbulent flow. 13 :58–69, 1949.
- [3] G. Balarac, J. Le Sommer, X. Meunier, and A. Volland. A dynamic regularized gradient model of the subgrid-scale scalar flux for large eddy simulations. *Physics of Fluids*, 25(7) :075107, 2013.
- [4] G. Balarac, H. Pitsch, and V. Raman. Development of a dynamic model for the subfilter scalar variance using the concept of optimal estimators. *Phys. Fluids*, 20(3) :1–8, 2008.
- [5] G. Balarac, H. Pitsch, and V. Raman. Modeling of the subfilter scalar dissipation rate using the concept of optimal estimators. *Phys. Fluids*, 20(9) :1–4, 2008.
- [6] J. Bardina, J. Ferziger, and W. Reynolds. Improved subgrid-scale models for large-eddy simulation. *AIAA*, 1980.
- [7] G.K. Batchelor. The effect of homogeneous turbulence on material lines and surfaces. pages 349–366, 1952.
- [8] G.K. Batchelor. Small scale variation of convected quantities like temperature in turbulent fluid. part 1. general discussion and the case of small conductivity. *Journal of Fluid Mechanics*, 5 :113–134, 1959.
- [9] K. W. Bedford and W. K. Yeo. Conjective filtering procedures in surface water flow and transport. *Large Eddy Simulation of Complex Engineering and Geophysical Flows*, edited by B. Galperin, and S. A. Orszag, Cambridge Univ. Press, New York, 1993.
- [10] L. P. Bernal and A. Roshko. Streamwise vortex structure in plane mixing layers. *J. Fluid Mech.*, 170, 1986.
- [11] C. Canuto, M.Y. Hussaini, A. Quarteroni, and T.A. Zang. *Spectral methods in fluid dynamics*. édition Springer-Verlag, 1988.
- [12] S.G. Chumakov. A priori study of subgrid-scale flux of a passive scalar in isotropic homogeneous turbulence. *Physical Review E*, 78(11) :036313, 2008.
- [13] R. A. Clark, J. H. Ferziger, and W. C. Reynolds. Evaluation of subgrid-scale models using an accurately simulated turbulent flow. *J. Fluid Mech.*, 91 :1–16, 1979.
- [14] Y. et Siary P. Colette. *Optimisation multiobjectifs*. Eyrolles, 2002.
- [15] G.-H. Cottet and A. A. Wray. Anisotropic grid-based formulas for subgrid-scale models. *Annual Research Brief, CTR, Stanford Univ.*, pages 113–122, 1997.
- [16] G. Cybenko. Approximation by Superpositions of a Sigmoidal Function. *Mathematics of control, signals, and systems*, pages 303–314, 1989.
- [17] C. B. da Silva and O. Métais. On the influence of coherent structures upon interscale interactions in turbulent plane jets. *J. Fluid Mech.*, 473 :103–145, 2002.
- [18] Carlos B. da Silva and José C.F. Pereira. The effect of subgrid-scale models on the vortices computed from large-eddy simulations. *Physics of Fluids*, 16(12) :4506, 2004.
- [19] C.B. da Silva and J.C.F. Pereira. Invariants of the velocity-gradient, rate-of-strain, and rate-of-rotation tensors across the turbulent/nonturbulent interface in jets. *Phys. Fluids*, 20(05), 2008.
- [20] R.D. Dean. Reynolds number dependence of skin friction and other bulk flow variables in two-dimensional rectangular duct flow. *Journal of Fluids Engineering*, 100(2) :215–222, 1978.

- [21] K Deb. *Multi-Objective Optimization using Evolutionary Algorithms*. 2001.
- [22] J. Decaix. *Modélisation et simulation de la turbulence compressible en milieu diphasique : application aux écoulements cavitants instationnaires*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Grenoble - INPG, 2012.
- [23] G. Dreyfus, J. M. Martinez, Samuelides M., M. B. Gordon, F. Badran, S. Thiria, and L. Héroult. *Réseaux de neurones : Méthodologie et applications*. Eyrolles, 2002.
- [24] F. Ducros. *Simulations numériques directes et des grandes échelles de couches limites compressible*. PhD thesis, INPG, 1995.
- [25] F. Ducros, P. Comte, and Lesieur M. Large-eddy simulation of transition to turbulence in a boundary layer developing spatially over a flat plate. *Journal of Fluid Mechanics*, 326 :1–36, 1996.
- [26] C. Duprat. *Simulation numérique instationnaire des écoulements turbulents dans les diffuseurs de centrales hydrauliques en vue de l'amélioration des performances*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Grenoble - INPG, 2010.
- [27] Igor Esau. On Application of Artificial Neural Network Methods in Large-eddy Simulations with Unresolved Urban Surfaces. *Science*, 4(8) :3–11, 2011.
- [28] V. Eswaran and S.B. Pope. Direct numerical simulations of the turbulent mixing of a passive scalar. *Phys. Fluids*, 31 :506–520, 1988.
- [29] Y. Fabre and G. Balarac. Development of a new dynamic procedure for the Clark model of the subgrid-scale scalar flux using the concept of optimal estimator. *Physics of Fluids*, 23(11) :115103, 2011.
- [30] C.M. Fonseca and P.J.F. Fleming. Genetic algorithms for multiobjective optimization : formulation, discussion and generalization. volume 1, pages 416–423, San Mateo, CA, 1993. Proceedings of the Fifth International Conference on Genetic Algorithms.
- [31] F.N. Frenkiel and R.E. Munn, editors. *Energy Cascade in Large-Eddy Simulations of Turbulent Fluid Flows*, volume 18, Part A of *Advances in Geophysics*. Elsevier, 1975.
- [32] M. Germano. Turbulence : the filtering approach. *Journal of Fluid Mechanics*, 238, 1992.
- [33] M. Germano, U. Piomelli, P. Moin, and W. H. Cabot. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Phys. Fluids A*, 3 :1760–1765, 1991.
- [34] Francesc Giralt, R Rallo, A Arenas, G A Kopp, and I Introduction. The simulation and interpretation of free turbulence with a cognitive. *Physics of Fluids*, 12(7) :1826–1835, 2000.
- [35] D. Goldberg. *Algorithmes génétiques*. Addison Wesley, 1994.
- [36] Marc B. Higgins, Chad W. Parlange and C. Meneveau. The heat flux and the temperature gradient in the lower atmosphere. *Geophysical research letters*, 31 :5, 2004.
- [37] Kiyosi Horiuti. Roles of non-aligned eigenvectors of strain-rate and subgrid-scale stress tensors in turbulence generation. *Journal of Fluid Mechanics*, 491 :65–100, September 2003.
- [38] Thomas J. R. Hughes, Luca Mazzei, Assad a. Oberai, and Alan a. Wray. The multiscale formulation of large eddy simulation : Decay of homogeneous isotropic turbulence. *Physics of Fluids*, 13(2) :505, 2001.
- [39] M. Ihme. Construction of Optimal Artificial Neural Architectures Application Network Architectures for Application Systems : Comparison of Generalized Pattern Application to Chemical to Chemical Systems : Comparison of Search Method Algorithm Systems : Comparison. *Artificial Neural Networks - Application*, 2011.
- [40] A. N. Kolmogorov. A refinement of previous hypotheses concerning the local structure of turbulence in a viscous incompressible fluid at high reynolds number. *Journal of Fluid Mechanics*, 13 :82–85, 5 1962.
- [41] A.N. Kolmogorov. The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large reynolds numbers. *Dokl. Akad. Nauk. SSSR*, 30 :299–303, 1941.

- [42] R.H. Kraichnan. Anomalous scaling of randomly advected passive scalar. *Physical Review Letter*, 75 :1016, 1994.
- [43] Guedot L., G. Lartigue, and V. Moureau. Design of implicit high-order filters on unstructured grids for the identification of large scale features en les and application to a swirl burner. *Physics of Fluid*, 27(045107), 2015.
- [44] J.-B. Lagaert, G. Balarac, and Cottet G.-H. Hybrid spectral-particle method for the turbulent transport of a passive scalar. *Journal of Computational Physics*, (260), 2014.
- [45] Jacob a. Langford and Robert D. Moser. Optimal LES formulations for isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 398(September 2000) :321–346, November 1999.
- [46] Jacob a. Langford and Robert D. Moser. Optimal large-eddy simulation results for isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 521(2004) :273–294, December 2004.
- [47] Jacob a. Langford and Robert D. Moser. Optimal large-eddy simulation results for isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 521(2004) :273–294, December 2004.
- [48] J. Le Sommer, F. d’Ovidio, and G. Madec. Parameterization of subgrid stirring in eddy resolving ocean models. part 1 : Theory and diagnostics. *Ocean Modelling*, 39 :154–169, 2011.
- [49] Changhoon Lee, John Kim, David Babcock, and Rodney Goodman. Application of neural networks to turbulence control for drag reduction. *Physics of Fluids*, 9(6) :1740, 1997.
- [50] M. Lesieur. *Turbulence in fluids*. Kluwer Academic Publisher, 1997.
- [51] D.K. Lilly. A proposed modification of the Germano subgrid-scale closure method. *Phys. Fluids A*, 4 :633–635, 1992.
- [52] Shewen Liu, Charles Meneveau, and Joseph Katz. On the properties of similarity subgrid-scale models as deduced from measurements in a turbulent jet. *Journal of Fluid Mechanics*, 275 :83–119, April 1994.
- [53] Aleksander Lodwich, Yves Rangoni, and Thomas Breuel. Evaluation of robustness and performance of Early Stopping Rules with Multi Layer Perceptrons. *2009 International Joint Conference on Neural Networks*, pages 1877–1884, June 2009.
- [54] M.D. Love. Subgrid modelling studies with Burgers’ equation. *Journal of Fluid Mechanics*, 100 :87–110, 1980.
- [55] B. Lund and E. Novikov. Parameterization of subgrid-scale stress by the velocity gradient tensor. *Center for Turbulence Research. Annual Research Briefs*, pages 27–43, 1992.
- [56] O. Métais and M. Lesieur. Spectral large-eddy simulation of isotropic and stably stratified turbulence. *J. Fluid Mech.*, 239 :157–194, 1992.
- [57] P. Moin, K. Squires, W. H. Cabot, and S. Lee. A dynamic subgrid-scale model for compressible turbulence and scalar transport. *Phys. Fluids A*, 3(11) :2746–2757., 1991.
- [58] A. Moreau. *Etude du mélange de scalaires en écoulement turbulent et application à la modélisation des petites échelles*. PhD thesis, MEGA, 2002.
- [59] A. Moreau, O. Teytaud, and J. P. Bertoglio. Optimal estimation for large-eddy simulation of turbulence and application to the analysis of subgrid models. *Physics of Fluids*, 18(10) :105101, 2006.
- [60] Youhei Morinishi, Shinji Tamano, and Eisuke Nakamura. New scaling of turbulence statistics for incompressible thermal channel flow with different total heat flux gradients. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 50(9-10) :1781–1789, May 2007.
- [61] Robert D. Moser, Nicholas P. Malaya, Henry Chang, Paulo S. Zandonade, Prakash Vedula, Amitabh Bhattacharya, and Andreas Haselbacher. Theoretically based optimal large-eddy simulation. *Physics of Fluids*, 21(10) :105104, 2009.
- [62] V. Moureau, P. Domingo, and Vervisch L. From large-eddy simulation to direct numerical simulation of a lean premixed swirl flame : Filtered laminar flame-pdf modeling. *Combustion and Flame*, 158(7) :1340–1357, 2011.

- [63] V Moureau, P. Domingo, and L. Vervisch. Design of a massively parallel cfd code for complex geometries. *C. R. Mecanique*, (2/3) :141–148, 2001.
- [64] D. Nguyen and B. Widrow. Improving the learning speed of 2-layer neural networks by choosing initial values of the adaptive weights. In *International Joint Conference on Neural Network*, pages 21–26 vol. 3, San Diego, CA, USA, 1990. IEEE.
- [65] Franck Nicoud, Hubert Baya Toda, Olivier Cabrit, Sanjeeb Bose, and Jungil Lee. Using singular values to build a subgrid-scale model for large eddy simulations. *Physics of Fluids*, 23(8) :085106, 2011.
- [66] S. Nissen. Implementation of a Fast Artificial Neural Network Library (fann), 2003.
- [67] W. Noll. Representations of certain isotropic tensor functions. *Archiv der Mathematik*, 21 :87–90, 1967.
- [68] K. K. Nomura and G. K. Post. The structure and dynamics of vorticity and rate of strain in incompressible homogeneous turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 337 :65–97, 1998.
- [69] N. Odier, G. Balarac, C. Corre, and V. Moureau. Numerical study of a flapping liquid sheet sheared by a high-speed stream. *International journal of multiphase flow*, 2015.
- [70] A. Papoulis. *Probability, Random Variables, and Stochastic Processes*. McGraw-Hill, 1965.
- [71] Ugo Piomelli, William H. Cabot, Parviz Moin, and Sangsan Lee. Subgrid-scale backscatter in turbulent and transitional flows. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, 3(7) :1766, 1991.
- [72] S. B. Pope. *Turbulent Flows*. Cambridge Univ. Press, 2000.
- [73] Stephen B Pope. Ten questions concerning the large-eddy simulation of turbulent flows. *New Journal of Physics*, 6 :35–35, March 2004.
- [74] L. F. Richardson. Weather prediction by numerical process, 1922.
- [75] M. Riedmiller and H. Braun. A Direct Adaptive Method for Faster Backpropagation Learning : The RPROP Algorithm. volume 1, pages 586–591, San Francisco, CA, 1993. IEEE.
- [76] R.S. Rivlin and J.L. Ericksen. Stress-deformation rates for isotropic materials. *Journal of Rational Mechanics and Analysis*, 4(2) :323–425, 1955.
- [77] R. S. Rogallo and P. Moin. Numerical simulation of turbulent flows. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 16 :99–137, 1984.
- [78] D. E. Rumelhart, G. E. Hinton, and R. J. Williams. Learning representations by error propagation. *Parallel Distributed Processing*, 1 :318–335, 1986.
- [79] Corrsin S. On the spectrum of isotropic temperature fluctuations in isotropic turbulence. *J. Appl. Phys*, 22 :469–473, 1951.
- [80] P. Sagaut. *Large eddy simulation for incompressible flows : an introduction (Third Edition)*. Springer, 2005.
- [81] P. Sagaut, S. Deck, and M. Terracol. *Multiscale & Multiresolution approaches for turbulence, 2nd edn*. Imperial College Press, 2013.
- [82] Omer San, Anne E Staples, and Traian Iliescu. A posteriori analysis of low-pass spatial filters for approximate deconvolution large eddy simulations of homogeneous incompressible flows. 1(1) :1–36, 2013.
- [83] F. Sarghini, G. de Felice, and S. Santini. Neural networks based subgrid scale modeling in large eddy simulations. *Computers and Fluids*, 32 :97–108, 2003.
- [84] I. E. Sarris, H. Jeanmart, D. Carati, and G. Winckelmans. Box-size dependence and breaking of translational invariance in the velocity statistics computed from three-dimensional turbulent Kolmogorov flows. *Physics of Fluids*, 19(9) :095101, 2007.
- [85] U Schumann. Subgrid scale model for finite difference simulations of turbulent flows in plane channels and annuli. *Journal of computational physics*, 404 :376–404, 1975.
- [86] J. Smagorinsky. General circulation experiments with the primitive equations : I. The basic experiment. *Monthly Weather Review*, 91 :99–164, 1963.

- [87] P. R. Spalart. Strategies for turbulence modelling and simulations. pages 3–17, Ajaccio, Corse, France, 1999. In Proc. Fourth Intl Symp. Eng. Turb. Modelling and Measurements.
- [88] A.J.M. Spencer and R.S. Rivlin. The theory of matrix polynomials and its application to the mechanics of isotropic continua. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 2 :309–336, 1959.
- [89] C.G. Speziale. Galilean invariance of subgrid-scale stress models in the large-eddy simulation of turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 156 :55–62, 1985.
- [90] G.I. Taylor. Statistical theory of turbulence : Parts i-iii. *Proc. R. Soc. London Ser. A*, 151 :421–464, 1935.
- [91] Rudolph van der Merwe, Todd K Leen, Zhengdong Lu, Sergey Frolov, and Antonio M Baptista. Fast neural network surrogates for very high dimensional physics-based models in computational oceanography. *Neural networks : the official journal of the International Neural Network Society*, 20(4) :462–78, May 2007.
- [92] A.W. Vreman. An eddy-viscosity subgrid-scale model for turbulent shear flow : Algebraic theory and applications. *Physics of Fluids*, 16(10) :3670, 2004.
- [93] B. Vreman, B. Geurts, and H. Kuerten. Realizability conditions for the turbulent stress tensor in large-eddy simulation. *J. Fluid Mech.*, 278 :351–362, 1994.
- [94] Bert Vreman, Bernard Geurts, and Hans Kuerten. LES of the temporal mixing layer using the Clark model. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, 1996.
- [95] Bert Vreman, Bernard Geurts, and Hans Kuerten. Large-eddy simulation of the turbulent mixing layer. *Journal of Fluid Mechanics*, 339 :357–390, May 1997.
- [96] Bing-Chen Wang, Jing Yin, Eugene Yee, and Donald J. Bergstrom. A complete and irreducible dynamic SGS heat-flux modelling based on the strain rate tensor for large-eddy simulation of thermal convection. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 28(6) :1227–1243, December 2007.
- [97] D. You and P. Moin. A dynamic global-coefficient subgrid-scale model for large-eddy simulation of turbulent scalar transport in complex geometries. *Phys. Fluids*, 21, 2009.
- [98] Donghyun You and Parviz Moin. A dynamic global-coefficient subgrid-scale model for large-eddy simulation of turbulent scalar transport in complex geometries. *Physics of Fluids*, 21(4) :045109, 2009.
- [99] Warhaft Z. Passive scalars inturbulent flows. *Annual Review Fluid Mechanical*, 32 :203–240, 2000.
- [100] Paulo S. Zandonade, Jacob a. Langford, and Robert D. Moser. Finite-volume optimal large-eddy simulation of isotropic turbulence. *Physics of Fluids*, 16(7) :2255, 2004.
- [101] Yan Zang, Robert L. Street, and Jeffrey R. Koseff. A dynamic mixed subgrid-scale model and its application to turbulent recirculating flows. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, 5(12) :3186, 1993.
- [102] Q-S Zheng. Theory of representations for tensor functions - A unified invariant approach to constitutive equations. *Applied Mechanics Reviews*, 47 :545,587, 1994.

Résumé

Dans ce travail, des méthodes de diagnostics et des techniques de développement de modèles sous-maille sont proposées pour la simulation des grandes échelles (SGE) du mélange turbulent. Plusieurs modèles issus de ces stratégies sont ainsi présentés pour illustrer ces méthodes.

Le principe de la SGE est de résoudre les grandes échelles de l'écoulement responsables des transferts principaux et de modéliser l'action des petites échelles de l'écoulement sur les échelles résolues. Formellement, cette opération revient à filtrer les équations décrivant le mélange turbulent. Cette opération fait apparaître des termes de sous-maille qui doivent être modélisés pour fermer les équations. Au cours de ce travail, nous nous sommes appuyés sur le classement des modèles sous-maille en deux catégories. Les modèles "fonctionnels" qui s'attachent à reproduire les transferts énergétiques entre les échelles résolues et les échelles modélisées et les modèles "structurels" qui cherchent à bien reproduire le terme sous-maille. Le premier enjeu important a été d'évaluer la performance des modèles sous-maille en prenant en compte leur comportement à la fois fonctionnel (capacité à reproduire les transferts d'énergie) et structurel (capacité à reproduire le terme sous-maille exact). Des diagnostics des modèles sous-maille ont pu être conduits avec l'utilisation de la notion d'estimateur optimal ce qui permet de connaître le potentiel d'amélioration structurelle des modèles.

Ces principes ont dans un premier temps servi au développement d'une première famille de modèles sous-maille algébrique appelée *DRGM* pour "Dynamic Regularized Gradient Model". Cette famille de modèles s'appuie sur le diagnostic structurel des termes issus de la régularisation des modèles de la famille du gradient. D'après les tests menés, cette nouvelle famille de modèle structurel a de meilleures performances fonctionnelles et structurelles que les modèles de la famille du gradient. L'amélioration des performances fonctionnelles consiste à supprimer la prédiction excessive de transferts inverses d'énergie (backscatter) observés dans les modèles de la famille du gradient. Cela permet ainsi de supprimer le comportement instable classiquement observé pour cette famille de modèles.

La suite de ce travail propose ensuite d'utiliser l'estimateur optimal directement comme modèle sous-maille. Comme l'estimateur optimal fournit le modèle ayant la meilleure performance structurelle pour un jeu de variables donné, nous avons recherché le jeu de variable optimisant cette performance. Puisque ce jeu comporte un nombre élevé de variables, nous avons utilisé les fonctions d'approximation de type réseaux de neurones pour estimer cet estimateur optimal. Ce travail a mené au nouveau modèle substitut *ANNM* pour "Artificial Neural Network Model". Ces fonctions de substitution se construisent à partir de bases de données servant à émuler les termes exacts nécessaires à la détermination de l'estimateur optimal. Les tests de ce modèle ont montré qu'il avait de très bonnes performances pour des configurations de simulation peu éloignées de la base de données servant à son apprentissage, mais qu'il pouvait manquer d'universalité.

Pour lever ce dernier verrou, nous avons proposé une utilisation hybride des modèles algébriques et des modèles de substitution à base de réseaux de neurones. La base de cette nouvelle famille de modèles *ACM* pour "Adaptative Coefficient Model" s'appuie sur les décompositions vectorielles et tensorielles des termes sous-maille exacts. Ces décompositions nécessitent le calcul de coefficients dynamiques qui sont modélisés par les réseaux de neurones. Ces réseaux bénéficient d'une méthode d'apprentissage permettant d'optimiser directement les performances structurelles et fonctionnelles des modèles *ACM*. Ces modèles hybrides allient l'universalité des modèles algébriques avec la performance élevée mais spécialisée des fonctions de substitution. Le résultat conduit à des modèles plus universels que l'*ANNM*.

Mots clés : Turbulence, Mélange, Simulation des Grandes Echelles, Estimateur optimal, Réseaux de neurones artificiels, Modèle sous-maille.

Abstract

This work develops subgrid model techniques and proposes methods of diagnosis for Large Eddy Simulation (LES) of turbulent mixing. Several models from these strategies are thus presented to illustrate these methods.

The principle of LES is to solve the largest scales of the turbulent flow responsible for major transfers and to model the action of small scales of flow on the resolved scales. Formally, this operation leads to filter equations describing turbulent mixing. Subgrid terms then appear and must be modeled to close the equations. In this work, we rely on the classification of subgrid models into two categories. "Functional" models which reproduces the energy transfers between the resolved scales and modeled scales and "Structural" models that seek to reproduce the exact subgrid term itself. The first major challenge is to evaluate the performance of subgrid models taking into account their functional behavior (ability to reproduce the energy transfers) and structural behaviour (ability to reproduce the term subgrid exactly). Diagnostics of subgrid models have been enabled with the use of the optimal estimator theory which allows the potential of structural improvement of the model to be evaluated. These methods were initially involved for the development of a first family of models called algebraic subgrid *DRGM* for "Dynamic Regularized Gradient Model". This family of models is based on the structural diagnostic of terms given by the regularization of the gradient model family. According to the tests performed, this new structural model's family has better functional and structural performance than original model's family of the gradient. The improved functional performance is due to the vanishing of inverse energy transfer (backscatter) observed in models of the gradient family. This allows the removal of the unstable behavior typically observed for this family of models.

In this work, we then propose the use of the optimal estimator directly as a subgrid scale model. Since the optimal estimator provides the model with the best structural performance for a given set of variables, we looked for the set of variables which optimize that performance. Since this set of variables is large, we use surrogate functions of artificial neural networks type to estimate the optimal estimator. This leads to the "Artificial Neural Network Model" (*ANNM*). These alternative functions are built from databases in order to emulate the exact terms needed to determine the optimal estimator. The tests of this model show that he it has very good performance for simulation configurations not very far from its database used for learning, so these findings may fail the test of universality.

To overcome this difficulty, we propose a hybrid method using an algebraic model and a surrogate model based on artificial neural networks. The basis of this new model family *ACM* for "Adaptive Coefficient Model" is based on vector and tensor decomposition of the exact subgrid terms. These decompositions require the calculation of dynamic coefficients which are modeled by artificial neural networks. These networks have a learning method designed to directly optimize the structural and functional performances of *ACM*. These hybrids models combine the universality of algebraic model with high performance but very specialized performance of surrogate models. The result give models which are more universal than *ANNM*.

Keywords : Turbulence, Mixing, Large Eddy Simulation, Optimal estimator, Artificial neural network, Subgrid scale models.