

## Vorticité et mélange dans les écoulements de Rayleigh-Taylor turbulents, en approximation anélastique et de Boussinesq

Nicolas Schneider

## ▶ To cite this version:

Nicolas Schneider. Vorticité et mélange dans les écoulements de Rayleigh-Taylor turbulents, en approximation anélastique et de Boussinesq. Mécanique des fluides [physics.class-ph]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2015. Français. <NNT : 2015PA066466>. <tel-01293020>

## HAL Id: tel-01293020 https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01293020

Submitted on 24 Mar 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.





# Université Pierre et Marie Curie École Doctorale de Sciences mécaniques, acoustique, électronique & robotique de Paris

**THÈSE DE DOCTORAT** Spécialité : Mécanique des fluides

## Vorticité et mélange dans les écoulements de Rayleigh-Taylor turbulents, en approximation anélastique et de Boussinesq

par Nicolas SCHNEIDER Organisme d'accueil : CEA / Bruyères-le-Châtel

Soutenue le 25/11/2015 devant le jury composé de :

M. Jean-Camille CHASSAING	Maître de Conférence, HdR Institut Jean Le Rond d'Alembert	Examinateur
M. Serge GAUTHIER	Directeur de Recherche CEA / Bruyères-le-Châtel	Directeur de thèse
M. Laurent JOLY	Professeur de l'ISAE, Toulouse	Rapporteur
M. Gérard LABROSSE	Professeur des Universités Université Paris-Sud	Examinateur
M. Emmanuel LERICHE	Professeur des Universités Université de Lille	Rapporteur
M. Frédéric MOISY	Professeur des Universités Université Paris-Sud	Examinateur

Je tiens à remercier en premier Serge Gauthier, Directeur de Recherches au CEA, qui a dirigé cette thèse. Merci pour ta présence, ton soutien et pour la qualité de tes conseils. Merci aussi d'avoir été aussi ouvert à mes diverses idées. Chacune, les bonnes comme les mauvaises, déclenchait une discussion sans a priori, constructive et enrichissante. Merci pour tout.

Je voudrais aussi vivement remercier Laurent Joly, Professeur de l'ISAE, et Émmanuel Leriche, Professeur à l'université de Lille, d'avoir accepté d'être rapporteurs de ma thèse, et pour leurs analyses approfondies de mon mémoire.

Jean-Camille Chassaing, Maître de Conférence à l'Université Pierre et Marie Curie a accepté de faire partie de mon jury de thèse. Frédéric Moisy, Professeur à l'université Paris-Sud, a présidé ce jury. Je les remercie chaleureusement tous les deux.

Je n'oublie pas Gérard Labrosse, Professeur à l'université Paris-Sud, que je remercie pour les discussions enrichissantes que nous avons eues sur les méthodes numériques, et pour avoir également accepté de faire partie de mon jury de thèse.

Je remercie vivement Jean-Marie Clarisse, du CEA. Merci aussi à Claude Gouédard, du CEA, pour son aide sur l'accélération du code de simulation.

Cette thèse n'aurait pas pu se réaliser sans les supercalculateurs du CCRT-TGCC, Titane, puis Airain et Curie. Merci beaucoup aux équipes de maintenance et de support aux utilisateurs, qui ont montré un grand professionnalisme. Merci à l'équipe en charge de la visualisation à distance, mise en place pendant ma première année de thèse et sans laquelle mon chapitre 4 aurait été nettement moins imagé.

Impossible d'oublier les collègues et camarades du fameux couloir des thésards, dans lequel j'inclus bien sûr quelques bureaux adjacents dont les propriétaires se reconnaîtront! Merci aux anciens d'avoir montré la voie et l'exemple : Laurent, Zohra, Clotilde. Je félicite mes courageux contemporains de m'avoir supporté pendant trois années, Guillaume T. (I'm gonna make this pencil... disappear!), Alan, Anaïs, Raphaël. Tous mes encouragements aux "jeunes" dynamiques et doués qui nous suivent, Florian, Lucile, Thibaud, Clément, Christelle, Alexis, Sophie. Une salutation aussi aux compères, post-docs et stagiaires, qui contribuent eux aussi à la bonne ambiance festive mais studieuse (si, si!) du couloir. Je pense à Tony, Quentin, Gentien (mes respects mon caporal-chef!), Clémentine, Mélanie, Guillaume L., Gontran. Merci à tous d'avoir fait et de faire de notre couloir un endroit agréable où travailler.

Un remerciement spécial et chaleureux à Claire, sans qui le CEA s'effondrerait dans la journée.

Finalement, merci à ma famille, pour tout.

# Table des matières

In	trod	uction	
1	Éta	t de l'a	art
	1.1	Résult	ats généraux, croissance et saturation, configuration idéale non-stratifiée
		1.1.1	Généralités et saturation de la croissance
		1.1.2	Configuration non-stratifiée
	1.2	Moyen	s d'études expérimentaux
		1.2.1	Retournement de plaque
		1.2.2	Retrait d'une membrane séparatrice
		1.2.3	Canal horizontal
		1.2.4	Accélération verticale d'un réservoir
		1.2.5	Rayleigh-Taylor et expériences laser
	1.3	Études	s numériques
		1.3.1	Considérations générales
		1.3.2	Simulations moléculaires
		1.3.3	Simulations Lattice-Boltzmann
		1.3.4	Simulations Euler et Navier-Stokes
2	Mo	dèles p	physiques pour l'instabilité de Bayleigh-Taylor
	2.1	L'insta	abilité de Rayleigh-Taylor pour des fluides newtoniens
		2.1.1	Adimensionnement des équations de Navier-Stokes
		2.1.2	Stratification et équations du système Bayleigh-Taylor
		2.1.3	Analyse asymptotique
	2.2	L'appr	roximation anélastique
	2.3	L'appr	roximation quasi-isobare
	2.0	2.3.1	Limite Boussinesa des équations quasi-isobares
	2.4	Le mo	dèle de Sandoval
	2.1	2.4.1	Établissement historique du modèle
		2.4.2	Établissement rigoureux du modèle
		2 4 3	Limite Boussinesa des équations de Sandoval
	2.5	L'appr	roximation de Boussineso
		2.5.1	Établissement des équations de Navier-Stokes
	2.6	Discus	sion sur les modèles physiques
	2.0	261	Récapitulatif
		2.6.2	Domaines de validité
	2.7	Équati	ions de transport de la vorticité
	2.1	2 7 1	En régime compressible
		2.7.1 272	En approximation anélastique
		2.1.2 273	En approximation de Boussinesa
	28	2.1.0 Équati	ions de transport de l'énergie cinétique turbulente
	2.0	2991	En régime compressible
		2.0.1	En regime compressible
		2.0.2	En approximation de Deugeinger
		2.8.3	En approximation de Boussinesq

3	Le	ode Aménophis : méthodes numériques et informatiques 6	53
	3.1	Méthodes numériques, principes généraux	34
		3.1.1 Problème de Stokes anélastique	36
		3.1.2 Méthode auto-adaptative	74
	3.2	Méthode numérique pour les équations de Boussinesq	75
		3.2.1 Opérateurs d'Uzawa	75
		3.2.2 Cas $k = 0$	76
		3.2.3 Modes parasites de pression en approximation de Boussinesq 7	76
	3.3	Modèle anélastique : analyses complémentaires	78
		3.3.1 État de base	78
		3.3.2 Modes parasites de pression en anélastique	79
	3.4	Améliorations pour les modèles anélastique et de Boussinesq	30
	-	3.4.1 Schéma temporel d'ordre 1 pour le premier cycle	30
		3.4.2 Méthode itérative	32
		3 4 3 Adaptations et raffinement de grille	37
	35	Tests élémentaires grille optimale	)1
	0.0	3.5.1 Dérivée et intégration Chebyshev	)2
		3.5.2 Dérivation d'une constante et transformation de coordonnées	)3
		3.5.3 Convergence exponentielle	34
		3.5.4 Convergence temporelle	)6
		3.5.5 Découpage optimal en sous-domaines	)0 )7
		3.5.6 Spectres de pression et de vitesse	)n
	3.6	Parallélisation du code Aménophis	)1
	5.0	3.6.1 Préambule : protocoles de programmation parallèle	)1 )9
		3.6.2 Parallélisation hybride sur trois étagos	שע 12
		5.0.2 1 aranensation hybride sur trois etages	50
4	Vali	dation du code Aménophis et visualisation d'écoulements Rayleigh-	
	Tay	or 10	)7
	4.1	Validation du code de simulation	)7
		4.1.1 Comparaison à la théorie linéaire	)8
		4.1.2 Comparaison à l'expérience monomode de Waddell	)9
		4.1.3 Bilan des validations	11
	4.2	Visualisation d'écoulements Rayleigh-Taylor	12
		4.2.1 Simulation anélastique monomode ANmono	12
		4.2.2 Simulation avec modèle de Boussinesq A01-Sr0	15
		4.2.3 Simulations anélastiques	22
		4.2.4 Bilan des visualisations	28
F	Dáo	ultota de la simulation en enneuimetion de Deussiness	0
0	5 1	Intraduction Introduction In approximation de Doussinesq 12	)0 )0
	0.1	5.1.1  Préambule : calcul des movements	29 21
		5.1.9 Stabilitá linágira	ידי וו∢
	50	Dégultate de la gimulation : généralitée	20 21
	0.2 5.2	Vitage progion énorgie ginétique et disgination	⊿נ ⊋⊑
	0.3	vitesse, pression, energie cinetique et dissipation	)) )[
		0.0.1       vitesse       12         5.2.2       Construct do flux do mostro       12	)) 11
		5.5.2 spectres de nux de masse	±1 4 1
		5.5.5 Dissipation	ŧΤ

#### Table des matières

	5.4	Vorticité	145
		5.4.1 Propriétés générales	145
		5.4.2 Bilan d'enstrophie	149
	5.5	Mélange	150
	5.6	Bilan	156
6	Rés	ultats des simulations avec le modèle anélastique	159
	6.1	Influence des paramètres de compressibilité sur les premières phases de crois-	
		sance anélastique	159
		6.1.1 Paramètres des simulations	159
		6.1.2 Analyse linéaire	160
		6.1.3 Croissance linéaire et non linéaire	162
		6.1.4 Visualisations des états finaux atteints	166
		6.1.5 Analyses complémentaires : température, divergence et nombre de Mach	<b>1</b> 68
	6.2	Couche de mélange turbulente anélastique	171
		6.2.1 Généralités	172
		6.2.2 Vitesse, pression, énergie cinétique et dissipation	175
		6.2.3 Mélange	186
		6.2.4 Compressibilité et effets thermiques	191
	6.3	Bilan	195
Co	onclu	sion	199
Α	Ass	emblage de la matrice de primitivation Chebyshev en présence de trans	_
	form	nation de coordonnées	<b>205</b>
в	Ana	lyse de stabilité linéaire du système anélastique	207
С	Cal	cul de densités de probabilité sur une grille non-uniforme	209
Bi	Bibliographie 21		213

v

## Introduction

### La fusion nucléaire

La fusion nucléaire est étudiée pour deux raisons principales. La première est d'essayer de mettre au point les réacteurs à fusion nucléaire. Leurs avantages sur les réacteurs à fission nucléaire sont indéniables. Ils génèrent très peu de déchets radioactifs et les éléments nécessaires à la réaction sont abondamment présents sur Terre, au contraire de l'Uranium. La deuxième motivation est militaire et liée aux bombes thermonucléaires.

Il existe différents moyens pour étudier expérimentalement des réactions de fusion nucléaire. Une des principales difficultés est de contenir suffisamment longtemps le mélange deutérium-tritium dans des conditions de pression et de température favorables au déclenchement des réactions de fusion. Il existe deux méthodes pour assurer ce confinement, comme conséquence du critère de Lawson (Boyd & Sanderson, 2003). Ce critère permet de relier les pertes d'énergie du plasma au temps de confinement et à la densité du plasma. Le but ultime des expériences de fusion nucléaire est d'atteindre l'ignition, un régime où les réactions thermonucléaires fournissent suffisamment d'énergie pour permettre un régime auto-entretenu. Les pertes énergétiques sont minimales pour les fortes densités de matières et les longs temps de confinement. Chacune des deux approches envisagées explore l'une de ces voies. La première est ce qu'on appelle le confinement magnétique, et est expérimentée dans les Tokamaks depuis les années 1950. Elle consiste à maintenir le plasma de deutérium et de tritium à très haute température pendant un temps macroscopique au moyen de champs magnétiques très puissants. Citons comme exemple ITER, en construction à Cadarache. La deuxième méthode est le confinement inertiel. Le mélange deutérium-tritium étant sous forme de capsule sphérique, le passage à l'état de plasma de la couche externe de la capsule crée une force de réaction inertielle qui comprime la partie intérieure de la capsule. La température et la pression augmentent et des réactions de fusion nucléaire peuvent être observées. Deux types d'installation expérimentales font appel au confinement inertiel : les machines Z-pinch et les lasers de forte puissance (NIF, laser MégaJoule).

Nous nous intéressons ici aux installations laser à forte puissance. L'expérience canonique qui est réalisée dans ce type d'installation est une irradiation laser indirecte d'une capsule de deutérium-tritium de forme sphérique. Du centre vers l'extérieur, la capsule est constituée d'un cœur de deutérium-tritium gazeux, d'une couche de deutérium-tritium solide et d'une couche d'ablateur (plastiques dopés). On parle d'attaque indirecte car la capsule n'est pas directement visée par les faisceaux laser. Ceux-ci pénètrent à l'intérieur d'un cylindre en or par ses deux extrémités et impactent ses parois intérieures (voir figure 1). L'énergie est absorbée puis réémise sous forme de rayonnement X, la géométrie choisie assurant la symétrie sphérique de ce rayonnement. L'ablateur de la capsule absorbe cette énergie, passe à l'état de plasma et est éjecté (voir figure 2). Par réaction, une force de compression est exercée sur les couches internes de la capsule qui se comprime à une vitesse de l'ordre de  $10^5 \ m.s^{-1}$ . La forme de la capsule à la fin de la conservation de la symétrie sphérique lors de l'implosion. Si celleci est parfaite et que l'énergie laser initialement injectée est suffisante, on peut observer des réactions de fusion nucléaire.



FIGURE 1 – Attaque indirecte d'une capsule de deutérium-tritium (image extraite de www-dam.cea.fr).



FIGURE 2 – Étapes de l'implosion d'une capsule de deutérium-tritium (image extraite de https ://en.wikipedia.org/wiki/Inertial\_confinement\_fusion). 1 : Les rayons X attaquent la capsule (marron : ablateur). 2 : L'ablateur passe à l'état de plasma et est éjecté. Par réaction, une force de compression apparaît. 3 : la compression se poursuit, la température et la densité augmentent jusqu'à atteindre 4 : l'ignition (dans le cas idéal).

### L'instabilité de Rayleigh-Taylor

Dans toute la suite, on utilise une description hydrodynamique de l'implosion de la capsule. L'instabilité hydrodynamique de Rayleigh-Taylor peut briser la symétrie de l'implosion et empêcher la fusion. Cette instabilité survient lorsqu'un fluide lourd et un fluide léger sont alignés dans le sens d'un champ d'accélération. Ils tendent alors à s'interpénétrer. La capsule de deutérium-tritium étant constituée d'une coquille externe dense et d'un cœur peu dense, cela constitue une configuration instable au sens de Rayleigh-Taylor en présence du champ d'accélération centripète de compression. Le développement de cette instabilité pendant la phase de compression engendre deux problèmes. Comme dit précédemment, la symétrie sphérique est perdue : au lieu d'atteindre un point (ou une sphère de taille très faible) à la fin de la compression, on obtient une structure irrégulière, allongée, moins dense et plus froide. De plus, à mesure que l'instabilité se développe, des structures constituées de fluide lourd se dirigent vers le cœur de la capsule. Ce qui signifie qu'à la fin de la compression, du plastique de la couche externe est présent au centre de la capsule comprimée (Remington, 2014). Le plastique étant neutre vis-à-vis des réactions nucléaires, il dilue le mélange et empêche la réaction de s'amorcer. La figure 3 présente l'évolution du diamètre de la capsule en fonction du temps, et les instants où l'instabilité de Rayleigh-Taylor se développe. Un secteur angulaire de la capsule (issu d'une simulation) est montré sur la droite de la figure, la couleur étant la densité. La présence de structures allongées liées à l'instabilité est clairement visible.

Une partie importante des recherches actuellement menées sur l'instabilité de Rayleigh-



FIGURE 3 – Instabilité de Rayleigh-Taylor au cours d'une implosion de capsule de deutériumtritium durant une simulation d'implosion (Casner *et al.*, 2012).

Taylor a pour but de mieux comprendre cette instabilité et de tenter d'en limiter la croissance. Cette instabilité survient également lors des explosions d'étoiles (supernovas, voir figure 4), ce qui constitue une autre raison d'étudier ce phénomène. Notons que l'instabilité de Rayleigh-Taylor se déclenche dans des sens opposés pour la fusion par confinement inertiel et pour les supernovas. Dans le premier cas, on est en présence d'une compression, le fluide lourd est à l'extérieur et le fluide léger à l'intérieur. Dans le deuxième cas, il s'agit d'une explosion, le fluide lourd est à l'intérieur et le léger à l'extérieur. Pour la présente étude, il a été fait



FIGURE 4 – Simulation 2D d'une Supernova de type II (Kifonidis *et al.*, 2006). La couleur est le logarithme de la densité. L'échelle de l'abscisse (en cm) n'est pas identique sur les trois images. Le temps s'écoule de gauche à droite.

le choix d'une géométrie cartésienne. Les deux directions horizontales sont considérées périodiques. Quant à l'accélération de la gravité, verticale, elle est supposée constante ce qui est une hypothèse assez forte. Après avoir exposé les motivations d'étude de l'instabilité de



FIGURE 5 – Configuration instable au sens Rayleigh-Taylor.

Rayleigh-Taylor, décrivons-là brièvement. Un état initial favorable au déclenchement de cette instabilité est présenté en figure 5. Un fluide lourd est situé au-dessus d'un fluide léger, le champ d'accélération étant vertical. Le type de structures formées pendant le développement de l'instabilité dépend des perturbations initialement présentes à l'interface entre les deux fluides. En présence d'une unique grande longueur d'onde, un unique champignon se forme (voir figure 6). On parle d'une perturbation monomode. Si de multiples petites longueurs d'onde constituent la perturbation initiale de l'interface, c'est une perturbation multimode et on assiste à la formation d'une couche de mélange (voir figure 7). C'est ce second type d'écoulements que l'on observe dans les expériences d'implosion de capsules par utilisation de lasers à forte puissance. Chronologiquement, on commence par observer une phase de croissance linéaire, qui dure tant que l'amplitude de la déformation de l'interface est faible devant la longueur d'onde majoritaire de déformation. Lorsque les structures formées sont à peu près aussi larges que hautes, une instabilité secondaire de Kelvin-Helmholtz apparaît, aux interfaces entre fluide lourd descendant et fluide léger ascendant. Les enroulements de fluide donnent aux structures un aspect de champignon. Jusqu'ici, les écoulements à perturbations monomode et multimode correspondent à la description. Cette phase est parfois appelée phase de chute libre dans la littérature. L'étape suivante est exclusive aux écoulements à perturbation multimode. À mesure que les champignons se développent, ils interagissent avec leurs voisins et se déstabilisent. On assiste à la formation d'une couche de mélange turbulente, qui s'épaissit avec le temps. La turbulence est la plus intense au centre de la couche, tandis que les bords sont constitués de grandes structures. Du côté du fluide lourd, on observe des bulles



FIGURE 6 – Instabilité de Rayleigh-Taylor initialisée par une perturbation monomode. Formation d'un champignon. Rouge : fluide lourd. Bleu : fluide léger. Le temps s'écoule de gauche à droite.

de fluide léger qui s'élèvent dans le fluide lourd. Si les deux fluides ont des masses volumiques suffisamment différentes (ce n'est pas le cas sur les figures 6 et 7), les bulles sont plus larges que les structures équivalentes de l'autre côté de la couche de mélange : les aiguilles. Celles-ci sont constituées de fluide lourd plongeant dans le fluide léger. Les fluides léger et lourd au repos sont entraînés dans la couche de mélange par ces grandes structures. Ils sont accélérés et étirés par la vorticité de l'écoulement, de façon de plus en plus intense à mesure qu'ils se rapprochent du centre de la couche de mélange. Quant aux grandes structures des frontières, elles interagissent et se regroupent, de telle sorte que leur taille augmente avec le temps. Ce mécanisme est parfois appelé fusion de bulles dans la littérature. De nombreux autres paramètres que la longueur d'onde influencent l'écoulement. Ce manuscrit insiste particulièrement sur les paramètres en lien avec les phénomènes de compressibilité. Il est possible de classer les effets de compressibilité en deux catégories. Les effets de compressibilité statique sont liés à la stratification des deux fluides. Ce sont les effets observés lorsque les fluides sont à l'état initial, au repos et en présence du champ de gravité. Les effets de compressibilité dynamique interviennent lors des mouvements du fluide. Ce sont les ondes acoustiques et les variations de masse volumique et de pression observées par exemple à l'endroit où le fluide est mis en mouvement par les bulles et aiguilles. Ces effets de compressibilité dynamique sont également liés à l'équation d'état du fluide et à l'équation d'énergie.

### Le code Aménophis

Le code de simulation numérique utilisé, amélioré et complété (voir chapitre 3) pendant cette thèse est le code Aménophis, pour Adaptive Multidomain psEudo-spectral Numerical methOd for the Parallelization of Hydrodynamic Instabilities Simulation. L'hypothèse de grand rayon de courbure permet de passer d'une géométrie sphérique à une géométrie cartésienne, les deux directions horizontales x et y étant supposées périodiques. Le code s'appuie sur une méthode spectrale, Fourier dans les deux directions horizontales et Chebyshev dans



FIGURE 7 – Instabilité de Rayleigh-Taylor initialisée par une perturbation multimode. Formation d'une couche de mélange. Rouge : fluide lourd. Bleu : fluide léger. Les masses volumiques des deux fluides sont proches, et le temps s'écoule de gauche à droite et de haut en bas.

la direction verticale z. La gravité est alignée avec l'axe z et est supposée constante. Une des propriétés notables de la croissance de l'instabilité de Rayleigh-Taylor est la variation de la position des gradients de concentration. À l'instant initial, ils sont concentrés sur le plan z = 0. Numériquement, cela signifie qu'une forte densité de points dans la direction z est nécessaire proche du plan z = 0. Dans tout le reste du domaine de calcul, les fluides sont de concentration constante et au repos, donc une faible densité de points de collocation dans la direction z suffit. Puisque le gradient est uniquement vertical, la grille horizontale de points n'a pas besoin d'être très raffinée. Rapidement, les structures grandissent (seconde image de la figure 7). Cela a deux conséquences : le besoin de points dans la direction z est décalé sur un intervalle qui s'élargit, centré autour du plan z = 0. De plus, la grille horizontale doit capturer le gradient initial de concentration, dont l'orientation suit la croissance des doigts. A la troisième image, la diffusion de concentration commence à se voir et le besoin de points z est surtout concentré aux fronts des structures. Puis la transition à la turbulence survient. La taille des plus petites échelles diminuant avec le temps, la grille de points de collocation doit être de plus en plus raffinée dans les trois directions à mesure que la simulation progresse en temps.

Ces constats ont conduit à implanter deux méthodes de gestion de la grille de points de collocation dans le code Aménophis. Dans la direction verticale, la grille de points est découpée en sous-domaines. Les interfaces entre ces domaines sont mobiles, et la répartition des points dans chaque domaine peut varier au cours du calcul. Ces variations de position et de répartition sont pilotées par un critère numérique et sont réalisées automatiquement au cours de la simulation. Cela permet notamment de suivre l'épaississement des structures de l'instabilité dans la direction z. La grille de points reste dense dans la couche de mélange (les domaines y sont concentrés) et la grille dans les fluides au repos est peu raffinée, ce qui économise des ressources de calcul. La deuxième méthode numérique permettant d'adapter la distribution des points de collocation à l'écoulement est manuelle. Elle permet de rajouter des modes de Fourier ou de Chebyshev dans chaque domaine, ainsi que d'augmenter le nombre de domaines. Pendant la phase linéaire, avant que la turbulence ne se développe, le nombre total de points nécessaires est peu important. Une petite grille de points de collocation suffit. Il est ensuite progressivement raffiné à mesure de l'avancement du calcul.

Le code de simulation Aménophis contient trois modèles physiques différents. Le premier est le modèle compressible complet qui contient les deux types de compressibilité. Le modèle anélastique est un modèle à bas nombre de Mach dont la propriété est de filtrer les ondes acoustiques (voir chapitre 2). La compressibilité statique est prise en compte, mais la compressibilité dynamique n'est que partiellement présente. Enfin, le modèle le plus simple est le modèle de Boussinesq, qui ne contient aucune compressibilité. Ces trois modèles ont chacun leur domaine de validité théorique, ainsi que leur domaine d'emploi usuel. Utiliser le modèle compressible pour des fluides peu compressibles n'est pas faux mais le temps de simulation est rédhibitoire en raison de la vitesse de propagation des ondes sonores et du pas de temps très faible induit par celle-ci.

Pendant cette thèse, le code Aménophis a été sensiblement modifié. Le modèle anélastique a été finalisé et validé. Le modèle de Boussinesq a été implanté. La résolution des équations des modèles anélastique et de Boussinesq, initialement réalisée de façon directe par inversion d'opérateurs matriciels, a évolué vers une résolution itérative plus robuste. La parallélisation du code a également été améliorée avec l'introduction d'un étage supplémentaire codé en OpenMP, et de diverses optimisations d'occupation mémoire. Le code de simulation obtenu constitue un bon outil pour l'étude de l'instabilité de Rayleigh-Taylor. Une première simulation réalisée avec le modèle de Boussinesq fournit un cas de référence et montre la croissance auto-semblable de la couche de mélange non stratifiée. Les valeurs de nombre de Reynolds de Taylor permettent une étude de la turbulence, qui est réalisée au moyen de calculs de spectres et de densités de probabilités. Le processus de mélange entre les deux fluides est également analysé. Certaines propriétés des écoulements turbulents homogènes et isotropes sont retrouvées au coeur de la couche de mélange, les petites échelles de l'écoulement oubliant en partie l'anisotropie des grandes échelles. Plusieurs simulations anélastiques permettent d'étudier les effets de compressibilité et les effets thermiques qui surviennent lors de la croissance de l'instabilité. Le ralentissement de la croissance causé par la stratification est observé, et le comportement du nombre de Mach est mesuré.

Les moyens d'étude actuels de l'instabilité de Rayleigh-Taylor (expériences et simulations) sont présentés, avec leurs avantages et leurs inconvénients, dans le chapitre 1 de ce manuscrit. Dans le chapitre 2, différents modèles physiques sont établis dans le cadre de l'instabilité de Rayleigh-Taylor, depuis le modèle compressible complet jusqu'au modèle de Boussinesq. Un établissement rigoureux du modèle de Sandoval (1995) est proposé. Les équations de transport de la vorticité et de l'énergie cinétique turbulente des modèles anélastique et de Boussinesq sont établies pour l'instabilité de Rayleigh-Taylor. Le chapitre 3 est dédié à la description de la méthode numérique originelle associée au modèle anélastique du code Aménophis. Les améliorations apportées à cette méthode numérique sont développées, ainsi que l'ajout de la résolution des équations de Boussinesq. La convergence des schémas d'espace et de temps est mesurée. On étudie aussi le découpage optimal de la grille de points en sous-domaines, avant d'aborder les méthodes informatiques retenues pour la parallélisation du code. Le chapitre 4 décrit la validation du code par comparaison à des expériences et présente des résultats visuels et qualitatifs, issus des simulations effectuées avec les modèles anélastique et de Boussinesq. Vient ensuite le chapitre 5, consacré à l'analyse d'une simulation faisant appel au modèle de Boussinesq. Le mélange et la vorticité sont notamment discutés au moyen de calculs de moyennes, de spectres, de densités de probabilités et d'indicateurs d'anisotropie. Enfin, le chapitre 6 s'intéresse aux quatre simulations effectuées avec le modèle anélastique. Les trois premières se concentrent sur les premières phases de croissance de l'instabilité tandis que la quatrième produit une couche de mélange. Elle est analysée avec les mêmes outils que ceux utilisés au chapitre 5.

## Chapitre 1 État de l'art

#### Sommaire

1.1 Rés	ultats généraux, croissance et saturation, configuration idéale non-		
$\operatorname{stratifiée}$			
1.1.1	Généralités et saturation de la croissance		
1.1.2	Configuration non-stratifiée		
1.2 Moy	yens d'études expérimentaux 14		
1.2.1	Retournement de plaque		
1.2.2	Retrait d'une membrane séparatrice		
1.2.3	Canal horizontal		
1.2.4	Accélération verticale d'un réservoir 17		
1.2.5	Rayleigh-Taylor et expériences laser 19		
1.3 Étu	des numériques 19		
1.3.1	Considérations générales		
1.3.2	Simulations moléculaires		
1.3.3	Simulations Lattice-Boltzmann		
1.3.4	Simulations Euler et Navier-Stokes		
	1.3.4.1 Généralités		
	1.3.4.2 Problématiques liées à la grille de points		
1.2.1 1.2.2 1.2.3 1.2.4 1.2.5 <b>1.3 Étu</b> 1.3.1 1.3.2 1.3.3 1.3.4	Retournement de plaque14Retrait d'une membrane séparatrice14Canal horizontal16Accélération verticale d'un réservoir17Rayleigh-Taylor et expériences laser19des numériques19Considérations générales19Simulations moléculaires20Simulations Lattice-Boltzmann20Simulations Euler et Navier-Stokes211.3.4.1Généralités211.3.4.2Problématiques liées à la grille de points24		

Ce chapitre est dédié à la description des travaux effectués jusqu'à présent pour l'étude de l'instabilité de Rayleigh-Taylor. Des résultats qualitatifs généraux sont donnés, de façon à fournir des idées générales sur les mécanismes physiques en jeu dans cette instabilité. On s'intéresse également de façon plus directe aux études, d'abord expérimentales. Les divers moyens de contrôler expérimentalement la croissance de l'instabilité sont décrits. Enfin, on évoque les (très) diverses études numériques réalisées. Une des principales difficultés dans la simulation de l'instabilité de Rayleigh-Taylor, la gestion d'une grille optimale de points, est abordée.

## 1.1 Résultats généraux, croissance et saturation, configuration idéale non-stratifiée

#### 1.1.1 Généralités et saturation de la croissance

Cette section est dédiée à la présentation d'un certain nombre de résultats classiques de l'instabilité de Rayleigh-Taylor. Le scénario du développement a été évoqué en introduction, on s'attardera ici davantage sur la dernière phase : la couche de mélange.

Commençons par définir les paramètres de l'état initial. Celui-ci est obtenu en supposant l'équilibre hydrostatique potentiellement instable des deux fluides. L'établissement précis est effectué au chapitre 2, les équations y étant fournies. Deux paramètres sont essentiels : le nombre d'Atwood At et le paramètre de stratification Sr. Le nombre d'Atwood est relatif au saut de masse volumique entre les deux fluides : At = 0 correspond à un saut nul, c'est-à-dire à une situation où les deux fluides ont la même masse volumique et où l'instabilité de Rayleigh-Taylor ne se développe pas. L'autre borne est At = 1, qui représente un fluide lourd de masse volumique finie au-dessus du vide. Ces deux cas limites sont exclus de la présente étude. Le paramètre de stratification rend compte des variations de masse volumique subies par chacun des fluides sous l'effet de la gravité. Ainsi, le fluide léger est plus dense en bas de sa moitié de domaine qu'en haut. Ce paramètre est directement relié à la compressibilité statique. La



FIGURE 1.1 – Abscisse : axe z, aligné avec la gravité. Ordonnée : profils de masse volumique initiale (ligne continue), de masse volumique finale (ligne pointillée). Gauche : At = 0.05, Sr = 0. Droite : At = 0.7, Sr = 4.

figure 1.1 présente deux profils typiques de masse volumique. À gauche, cela correspond à une situation de Boussinesq typique, à savoir un petit nombre d'Atwood et une stratification nulle. La situation à droite est opposée, il s'agit d'une configuration fortement compressible, grand nombre d'Atwood et grande stratification. L'état final après mélange est représenté en pointillés. Dans le cas d'une situation à stratification nulle, la croissance n'est limitée que par la taille de la boîte de simulation ou d'expérience. La croissance est donc permanente et du fluide au repos, lourd en haut et léger en bas, est continuellement entrainé dans la couche de mélange. De plus en plus d'énergie potentielle est convertie en énergie cinétique, qui cascade ensuite en turbulence. Dans la situation stratifiée, la situation est sensiblement différente. On observe que le maximum de masse volumique du fluide lourd est moins élevé que celui du fluide léger localisé tout en bas de la cuve. Symétriquement, le minimum de masse volumique du fluide léger est supérieur à la masse volumique du fluide lourd en haut de la boîte. Ainsi, il va venir un temps où le fluide lourd qui plonge sous forme d'aiguilles dans le fluide léger est entouré de fluide plus lourd que lui; et où le fluide léger qui s'élève sous forme de bulles dans le fluide lourd est entouré de fluide plus léger que lui. On observe alors une saturation et un arrêt de la croissance de la couche de mélange (Gauthier, 2013). Ce phénomène de saturation est illustré figure 1.2. On peut voir la disparition de mouvements verticaux sur l'image de droite, et un mélange progressif des fluides lourd et léger dans un espace borné. La vorticité tend progressivement vers 0, et le profil de masse volumique en fonction de l'altitude est strictement croissant. Les phénomènes convectifs ne peuvent plus croître. De bas en haut, le domaine est séparé en trois zones : fluide léger au repos, mélange en retour progressif au



FIGURE 1.2 – Simulation numérique 2D multimode compressible de l'instabilité de Rayleigh-Taylor, effectuée avec le code Aménophis. Le nombre d'Atwood est modéré, At = 0.25, et la stratification est très forte, Sr = 6. La grandeur affichée est la concentration en fluide lourd (c = 1 en rouge est le fluide lourd, c = 0 en bleu est le fluide léger). Gauche : t = 2.9, instant du maximum de la vorticité. Droite : t = 10. La croissance est stoppée et le fluide bloqué verticalement se mélange.

repos, fluide lourd au repos. Le mélange complet a lieu par diffusion pour  $t \to \infty$ .

Les études réalisées avec stratification sont moins nombreuses que les autres, en raison du coût pour les simulations, et des problèmes techniques pour les expériences (au moins une équipe les a réalisées, voir section 1.2.2). L'autre raison est que la présence de compressibilité complexifie la croissance de l'instabilité de Rayleigh-Taylor. Le régime de croissance à stratification nulle, infini et monotone, est plus simple et correspond à une situation « canonique ». Il est donc compréhensible que ce type de configuration reçoive beaucoup d'attention.

#### 1.1.2 Configuration non-stratifiée

Intéressons-nous à une configuration non stratifiée de l'instabilité de Rayleigh-Taylor, et commençons par un petit exercice. Comment former une longueur caractéristique à partir des grandeurs du problème ? On peut penser à la dimension horizontale, mais le problème est périodique dans ces directions. Si le domaine de simulation est assez large et que les grandes structures sont assez nombreuses pour ne pas interagir avec elles-mêmes à travers la périodicité, alors on dit que la simulation n'est pas « confinée » et la dimension horizontale n'a pas de signification particulière. La taille verticale du domaine ? En général, elle est choisie suffisamment grande pour que la couche de mélange ne s'approche pas des parois inférieure ou supérieure. On peut donc imaginer qu'on multiplie par deux, ou dix la taille verticale : rien ne change, les parois ne sont vues par l'écoulement dans aucun des cas. Au final, la seule manière de former une taille caractéristique est à partir de l'accélération de la gravité et du temps, on écrit  $\ell = gt^2$ . On peut alors supposer que la demi-épaisseur h de la couche de mélange croît selon  $gt^2$ . En prenant l'hypothèse de croissance auto-semblable pour la couche de mélange,

Ristorcelli & Clark (2004) ont établi une équation différentielle pour h, donc la solution est du type

$$h(t) = \frac{1}{4}C_0 At g t^2 + \sqrt{C_0 At g h_0} t + h_0, \qquad (1.1)$$

où  $C_0^2$  est la moyenne de la concentration au carré dans le plan médian z = 0, qui reste constante au cours du temps sous l'hypothèse de croissance auto-semblable de la couche de mélange. L'épaisseur  $h_0$  est l'épaisseur de la couche de mélange lors de la transition à la turbulence. Aux temps longs, on retrouve  $h(t) = \frac{1}{4}C_0 At g t^2$ , résultat compatible avec l'analyse dimensionnelle. Comme évoqué en introduction, lorsque le nombre d'Atwood n'est pas négligeable devant 1, on observe une asymétrie entre les deux côtés de la couche de mélange, ce qui donne lieu à deux constantes  $\alpha$ , qu'on note  $\alpha_b$  pour le côté supérieur des bulles et  $\alpha_s$  pour le côté inférieur des aiguilles. La communauté Rayleigh-Taylor s'est longuement attachée à déterminer si la constante  $\alpha_b$  est universelle, et si oui, à trouver sa valeur.

Les expériences ont déterminé des valeurs autour de  $\alpha_b = 0.05 - 0.07$ . Les premières simulations numériques il y a une ou deux décennies ont trouvé des valeurs comparables (Dimonte et al., 2004). Cependant, à mesure que les grilles de points devinrent de plus en plus raffinées et les schémas numériques de plus en plus précis, les valeurs de cette constante ont baissé, jusqu'à ce que l'écart avec les valeurs expérimentales devienne franc. L'intérêt s'est porté sur la nature des conditions initiales, et il a été remarqué que la valeur de  $\alpha_b$  varie (notamment) en fonction de la quantité de grandes longueurs d'ondes présentes dans la perturbation initiale de l'interface entre les deux fluides. Les simulations utilisent le plus fréquemment un anneau de grands nombres d'onde  $k \in [k_1, k_2]$  pour définir la perturbation, alors que dans les expériences, les petits nombres d'onde sont très présents. Des simulations numériques réalisées avec des initialisations mimant celles des expériences ont permis de retrouver les valeurs de  $\alpha_b$  expérimentales.

Si on évoque uniquement les simulations numériques initialisées avec un anneau de grands nombres d'onde, on constate néanmoins toujours une petite diminution de la constante avec le temps et le progrès de la précision des codes. Le consensus actuel est  $0.02 < \alpha_b < 0.03$ . L'avenir nous dira si ces valeurs sont convergées ou encore amenées à diminuer.

Il est possible de déterminer des lois d'évolution temporelle pour un certain nombre de propriétés de l'écoulement. Leur expression théorique est obtenue en supposant la croissance auto-semblable, et on constate que les expériences et les simulations s'accordent assez bien avec ces lois. Le nombre de Reynolds externe  $Re_h$  est défini à partir de l'épaisseur de la couche de mélange 2h et de la vitesse d'épaississement  $2\dot{h}$  de celle-ci. Le nombre de Reynolds  $Re_h$  varie donc en  $t^3$ . L'écoulement est de plus en plus turbulent. Cela se vérifie en étudiant les nombres de Reynolds basés sur les micro-échelles horizontale ou verticale de Taylor, qui croissent constamment. Les nombres de Reynolds de Taylor ont un profil lentement variable à l'intérieur de la couche de mélange : ils sont plus forts au centre et décroissent lentement quand on s'approche des bords, au niveau desquels ils s'effondrent. Quant aux échelles de l'écoulement, on calcule les comportements auto-semblables suivants : l'échelle intégrale croît en  $t^2$ , les micro-échelles de Taylor croissent en  $t^{1/2}$  et l'échelle de Kolmogorov décroît en  $t^{-1/4}$ . On voit la difficulté d'étude de l'instabilité d'un point de vue simulation numérique : il faut un domaine de simulation suffisamment grand horizontalement pour éviter des effets de confinement liés à la périodicité, suffisamment grand verticalement pour éviter que la couche de mélange n'interagisse avec les parois, mais aussi une grille de points suffisamment fine pour capturer les petites échelles dont la taille diminue avec le temps.

On peut établir le scénario suivant concernant l'évolution de la couche de mélange au cours

## 1.1. Résultats généraux, croissance et saturation, configuration idéale non-stratifiée

du temps (voir figure 1.3). Le temps progresse vers la droite. En passant de  $t = t_1$  à  $t = t_2$ , la couche de mélange s'épaissit. Dans le même temps, les structures à la frontière de la couche (bulles et aiguilles) grossissent. Le nombre de Reynolds turbulent à l'intérieur de la couche de mélange croît. Il est ici nécessaire d'aborder un phénomène décrit par Breidenthal (1981) et par Dimotakis (2000) : la transition de mélange. Il a été observé dans de multiples situations qu'un écoulement turbulent impliquant au moins deux fluides peut franchir un palier (qui dépend du Reynolds) et au-delà duquel le processus de mélange devient subitement plus efficace. La quantité de fluide mélangé augmente rapidement. Au delà de ce palier, l'efficacité de mélange ne varie presque plus en fonction du Reynolds. Pour fixer les idées, Dimotakis fournit deux ordres de grandeur pour la transition : Reynolds macroscopique de 10<sup>4</sup> et/ou Reynolds basé sur la micro-échelle de Taylor égal à 100. Cette transition de mélange a été observée pour



FIGURE 1.3 – Etapes de développement de l'instabilité de Rayleigh-Taylor,  $t_1 < t_2 < t_3$ . Le trait bleu désigne la zone turbulente et la zone rouge (pointillés) la zone à transition de mélange. Le nombre de Reynolds ne cesse d'augmenter avec le temps.

l'instabilité de Rayleigh-Taylor en LES par Cook *et al.* (2004), et en DNS par Cabot & Cook (2006) au moyen du modèle physique de Sandoval (1995). Au moment de la transition au centre de la couche de mélange, là où le Reynolds est le plus élevé, l'accroissement de la quantité de fluide mélangé s'accompagne d'un ralentissement temporaire de l'épaississement de la couche de mélange. Revenons à la figure 1.3. À l'instant  $t = t_3$ , une portion du centre de la couche de mélange a passé la transition de mélange. Cette proportion va augmenter avec le temps. On peut donc distinguer deux stades de l'instabilité de Rayleigh-Taylor, qui présentent tous deux un régime de croissance auto-semblable, rien n'indiquant que ces deux régimes soient identiques. Le premier est celui représenté par  $t = t_1$  et  $t = t_2$ . L'écoulement est turbulent et se sépare en trois zones, de bas en haut : aiguilles, zone centrale turbulente et bulles. Le deuxième stade, représenté par  $t = t_3$  se sépare en 5 zones : aiguilles, zone turbulente avant transition, zone turbulente après transition, zone turbulente après transition, zone turbulente avant transition et zone de

turbulence forte après transition. A mesure que le nombre de Reynolds continue d'augmenter, la majorité de la couche de mélange devrait être en phase de turbulence forte. L'évolution avec le temps de la proportion de la couche de mélange avant transition, située à la périphérie entre les structures de frontière (bulles ou aiguilles) et la partie de la couche de mélange après transition, n'a à ma connaissance pas été étudiée.

Une autre caractéristique importante de l'écoulement Rayleigh-Taylor est l'anisotropie, conséquence du terme de forçage aligné avec la direction verticale. Elle est mesurée aux grandes échelles, et se stabilise environ à  $u_z^{rms}/u_x^{rms} \rightarrow 1.8$ . Aux échelles intermédiaires et aux petites échelles, l'anisotropie est beaucoup moins marquée, en réalité on retrouve une quasi-isotropie dans certains cas. L'étude de l'anisotropie aux différentes échelles et les raisons qui l'expliquent est encore un sujet non complètement résolu (Livescu *et al.*, 2010). Il sera évoqué au chapitre 5.

Laney *et al.* (2006) développe un algorithme topologique de comptage de bulles sur des isosurfaces de densité, basé sur les complexes de Morse-Smale. Ils mettent en évidence que l'évolution du nombre de bulles en fonction du temps suit des lois d'échelles différentes suivant la phase de croissance de l'instabilité. En particulier, la décroissance du nombre de bulles accélère pendant la phase de transition de mélange, avant de ralentir dans la phase de turbulence forte après transition de mélange.

### 1.2 Moyens d'études expérimentaux

Les études expérimentales réalisées sur l'instabilité de Rayleigh-Taylor sont assez diverses. Une difficulté évidente est de contrôler le moteur de l'instabilité. Pour l'instabilité de Rayleigh-Bénard par exemple, il est nécessaire de contrôler le chauffage et le refroidissement du fluide aux frontières du réservoir de fluide. C'est techniquement réalisable et le nombre de Rayleigh est appelé « paramètre de contrôle ». Il est cependant impossible de contrôler la gravité, c'est pourquoi plusieurs familles de méthodes ont été employées pour contourner ce problème. Elles sont présentées dans la suite de ce chapitre, avec quelques exemples de travaux les utilisant.

#### 1.2.1 Retournement de plaque

La méthode historique la plus simple pour étudier la phase linéaire de l'instabilité de Rayleigh-Taylor est la suivante. De l'huile est disposée sur une plaque en verre horizontale, de façon à ce que l'épaisseur d'huile soit inférieure au millimètre. L'ensemble est laissé au repos un moment, de façon à assurer la planéité de la surface d'huile. Dans un deuxième temps, la plaque est retournée : elle est toujours horizontale mais l'huile est située sous la plaque. Ce système est instable au sens Rayleigh-Taylor. L'huile joue le rôle du fluide lourd, et l'air du laboratoire est le fluide léger. La phase linéaire de l'instabilité est observable, ce qui n'est pas le cas des phases ultérieures de l'instabilité, en raison de la faible épaisseur d'huile. La croissance des structures de l'instabilité est liée à l'épaisseur locale d'huile. Celle-ci peut être mesurée simplement au moyen de photographies prises verticalement. Fermigier *et al.* (1992) ont utilisé cette technique.

#### 1.2.2 Retrait d'une membrane séparatrice

On considère un réservoir séparé en deux moitiés par une interface solide. Le fluide lourd est positionné dans la partie supérieure et le fluide léger dans la partie inférieure. La plaque



FIGURE 1.4 – Gauche : réservoir avec membrane séparatrice. Un film recouvre la plaque et se replie pendant le retrait de celle-ci pour éviter la formation d'une couche limite. Droite : images obtenues par Planar Laser-Induced Fluorescence de l'expérience. Le nombre d'Atwood est très faible  $At = 2 \times 10^{-3}$ . L'image (a) coïncide avec le retrait total de la plaque de séparation (Andrews & Dalziel, 2010).

de séparation est enlevée à t = 0, étape qui présente deux inconvénients. Premièrement, l'instabilité ne commence pas sa croissance au même instant sur toute la largeur du réservoir, ce qui induit des variations horizontales d'épaisseur de la couche de mélange, ainsi que des mouvements horizontaux parasites. Ensuite, le retrait de la plaque de séparation crée des mouvements de fluide par viscosité, qui polluent le début de croissance de l'instabilité. La figure 1.4 présente un dispositif expérimental ainsi qu'une photo issu d'une expérience (Andrews & Dalziel, 2010).

Dalziel et al. (1999) ont utilisé cette méthode pour étudier la sensibilité des couches de mélange aux conditions initiales. Le nombre d'Atwood est très faible,  $At = 10^{-3}$ . Il est constaté que la structure spatiale des conditions initiales influence la croissance de l'instabilité de Rayleigh-Taylor sur le long terme. Cela est cependant restreint aux grandes échelles initiales qui structurent la forme de la couche de mélange. En effet, le détail des petites échelles des perturbations initiales est rapidement oublié lors de la transition à la turbulence. Au cœur de la couche de mélange, un état auto-semblable est observé et est indépendant des grandes structures des conditions initiales, formées par le retrait de la plaque de séparation. Résultat différent donc de la situation où la couche de mélange est considérée dans son ensemble. Le mélange en général et les spectres de concentration en particulier sont comparés à des simulations numériques et montrent un niveau acceptable de concordance.

Réaliser une expérience en présence de stratification comme conséquence de la gravité

paraît aujourd'hui impossible. L'effet de variation de masse volumique est mesurable sur une échelle d'altitude trop grande qui est incompatible avec une expérience de laboratoire. Lawrie & Dalziel (2011) ont utilisé des couches de fluides à différentes concentrations en sel pour reproduire un profil stratifié de masse volumique. L'expérience évoquée permet de constater la saturation de la croissance de l'instabilité et l'extinction du mouvement dans la couche mélange prise au piège de la stratification. Une vidéo de l'expérience est consultable sur internet<sup>1</sup>. Insistons sur le fait que cette stratification est d'origine différente de celle résolue par le code Aménophis et présentée précédemment dans ce manuscrit. En particulier, le rôle de la concentration n'est pas le même. Pour l'expérience de Lawrie et Dalziel, il s'agit de concentration en soluté, qui varie de façon à peu près similaire au profil de masse volumique présenté en figure 1.1 (droite). Pour le code Aménophis, la grandeur concentration est la concentration en fluide lourd, qui est donc homogène dans un fluide pur (lourd c = 1, léger c = 0, voir chapitre 2 pour les détails). L'équation de mélange ne prédit donc pas la même évolution. De plus, la compressibilité dynamique est absente de l'expérience car les fluides sont des liquides. Ce type de compressibilité est en revanche présente dans les simulations, qui mettent en jeu des gaz parfaits. L'essentiel du mélange survient après que l'étendue verticale de la couche de mélange cesse d'augmenter, et après les maximums de vorticité et d'énergie cinétique. L'explication tient à différents facteurs. Lorsque l'épaississement s'arrête, le profil de masse volumique moyenné horizontalement  $\overline{\rho(z)}^{xy}$  cache des hétérogénéités importantes. L'écoulement est donc localement instable à l'intérieur de la couche bornée. De l'énergie potentielle continue d'être relâchée, ceci contribuant au mélange. Enfin, la saturation favorise l'homogénéisation et le retour à l'isotropie de l'écoulement puisque les fluides purs ne pénètrent plus dans la couche de mélange.

#### 1.2.3 Canal horizontal



FIGURE 1.5 – Gauche : canal expérimental. Droite : photographies d'écoulements, (a) eau salée avec colorant située au-dessus d'eau pure, (b) eau salée au-dessus de l'eau, un additif visible sur certaines gammes de pH permettant de visualiser le fluide en cours de mélange (Mueschke *et al.*, 2009).

Une autre idée est de travailler avec un écoulement en translation. Les fluides sont injectés dans un canal horizontal, fluide lourd au-dessus du fluide léger. Le canal est séparé en deux au

<sup>1.</sup> https://youtu.be/NI85oC-3mJ0

moment de l'injection, puis la séparation s'amincit avant de disparaître. Un nid d'abeille placé avant l'amincissement assure un écoulement peu ou pas turbulent jusqu'à ce que les fluides se rencontrent. Les effets de couche limite de la membrane perturbent nécessairement un peu l'écoulement. La figure 1.5 présente un dispositif de ce type, ainsi que des photographies de l'écoulement. On constate la présence simultanée des différentes phases de l'instabilité de Rayleigh-Taylor, la dimension d'espace se substituant au temps. Sur la gauche, la phase linéaire est visible. Un peu plus à droite, des structures en forme de doigts puis de champignons se forment. Enfin, une couche de mélange est présente sur la droite des images.

Historiquement, les premiers à utiliser un canal de ce genre pour l'étude de l'instabilité de Rayleigh-Taylor sont Snider & Andrews (1994). Les différences de masse volumique apparaissent par l'utilisation d'eau chaude et d'eau froide. Les nombres d'Atwood considérés sont très faibles (inférieurs à  $10^{-3}$ ), on se situe donc dans le régime de Boussinesq. Les étapes de la croissance sont observées, jusqu'à la couche de mélange auto-semblable. L'évolution de la fraction de mélange est analysée.

Mueschke *et al.* (2009) ont utilisé ce type de dispositif. Les fluides lourd et léger sont de l'eau, respectivement froide et chaude. Le nombre d'Atwood est très faible,  $At = 7.5 \times 10^{-4}$ , de sorte qu'aucun phénomène de compressibilité n'intervient. Les caractéristiques du mélange, notamment en termes de fluctuations de masse volumique et de fraction de mélange moléculaire, ont été mesurées. La transition entre phase linéaire et non-linéaire et le passage à une couche de mélange sont étudiés, dans le domaine physique et dans le domaine spectral. Enfin, les perturbations de l'interface entre les deux fluides à la disparition de la lame séparatrice ont été mesurées par Planar Laser-Induced Fluorescence et injectées comme conditions initiales dans une simulation numérique directe. La comparaison simulation-expérience montre un accord quantitatif correct.

Banerjee *et al.* (2010) ont également utilisé un canal horizontal pour leur étude. Des gaz sont cette fois utilisés, air et mélange air-hélium. Le nombre d'Atwood varie entre At =0.03 jusque At = 0.6, expérience dans laquelle de forts effets de compressibilité dynamique interviennent. Les valeurs de  $\alpha_b$  sont mesurées pour chacune des expériences, et sont lentement croissantes avec le nombre d'Atwood. Les effets d'anisotropie sont quantifiés. La dissipation et la fraction de mélange moléculaire sont également mesurées et fournissent des valeurs de référence pour les simulations. Le flux de masse vertical  $\rho'v'$  est longuement étudié. Des spectres et des densités de probabilité (PDF pour *Probability Density Function*) évaluées dans la couche de mélange sont fournies. Pour les expériences à grand nombre d'Atwood, ce terme est évalué à chaque frontière de la couche de mélange. Des écarts avec les écoulements de Boussinesq (faible At) sont décrits, le flux de masse et les fluctuations de vitesse sont plus grandes côté aiguilles que côté bulles.

Évoquons également Ramaprabhu & Andrews (2004*a*) qui ont réalisé des expériences avec ce type de dispositif. L'étude s'est concentrée sur la mesure de spectres et l'analyse de l'anisotropie. Il est observé que les forces de flottabilité interviennent dans une gamme d'échelles comparables au régime inertiel, mais n'a pas d'influence mesurable sur la pente en -5/3 du spectre de vitesse.

#### 1.2.4 Accélération verticale d'un réservoir

Une autre idée est d'accélérer un réservoir de fluide verticalement vers le bas. Si l'accélération imposée est supérieure à l'accélération de la gravité terrestre g, alors l'accélération ressentie par le réservoir est dirigée vers le haut. Les fluides, initialement positionnés en po-



FIGURE 1.6 – Gauche : dispositif d'accélération verticale. Le réservoir contenant un fluide léger placé au-dessus un fluide lourd est accéléré vers le bas avec une accélération supérieure à l'accélération de la gravité terrestre (Olson & Jacobs, 2009). Droite : visualisations de couche de mélange Rayleigh-Taylor. Haut, At = 0.16, mesure par PLIF - bas, At = 0.21, photographie rétroéclairée.

sition stable pour la gravité terrestre, constituent alors une configuration instable au sens Rayleigh-Taylor. L'avantage de cette méthode est de ne nécessiter aucune barrière pour séparer les deux fluides à l'instant initial. L'inconvénient principal de ce dispositif est que le temps de croissance est nécessairement borné par la taille verticale de l'installation. La déformation initiale de l'interface peut être imposée au moyen de vibrations verticales imposées à la cuve, qui déclenchent une instabilité de Faraday. Il se forme des ondes de déformation à la surface de séparation entre les deux fluides. Ces ondes sont d'amplitudes bien supérieures à la déformation de la surface créée par les fluctuations thermiques ou acoustiques, issues de la salle d'expérience.

Présentons maintenant brièvement quelques résultats d'expérience, pour la couche de mélange, la croissance de champignons et la phase linéaire. Les expériences d'Olson & Jacobs (2009) sont suffisamment longues pour étudier la dynamique de la couche de mélange. Des mesures de vitesse de croissance sont effectuées et comparées à la loi de croissance autosemblable  $h_b = \alpha_b At g t^2$ , où  $h_b$  représente la taille de la moitié supérieure de la couche de mélange (côté bulles) et t le temps. Les valeurs de  $\alpha_b$  trouvées sont comprises entre 0.03 et 0.04. Une indépendance de  $\alpha_b$  avec l'amplitude des perturbations initiales est observée. Les valeurs de  $\alpha_b$  sont plus faibles que pour d'autres expériences, l'explication donnée étant l'absence de grandes longueurs d'onde dans les perturbations initiales.

Waddell *et al.* (2001) se sont eux intéressés à la croissance de quelques champignons. Une perturbation monomode est imposée à la cuve par oscillations horizontales, le tout en présence de deux fluides de masse volumique proche (faible nombre d'Atwood). L'expérience est menée jusqu'à la formation et la déstabilisation des structures en forme de champignons. Concernant la phase linéaire, l'écart entre les taux de croissance expérimentaux et ceux fournis par la théorie linéaire ne dépasse pas 10%. Un accord avec un modèle de vitesse de bulles et d'aiguilles est trouvé.

Avant cela, Jacobs & Catton (1988b) ont utilisé un dispositif légèrement différent (propulsion à air comprimé, non représenté ici) pour étudier les premières phases de la croissance de l'instabilité. Des oscillations horizontales de la cuve provoquent l'apparition d'ondes à l'interface. La croissance linéaire est mesurée et comparée à la théorie. Un modèle, valide pour le début de la phase non-linéaire, c'est-à-dire avant formation des champignons, est confronté aux expériences avec succès (Jacobs & Catton, 1988a). La phase de couche de mélange n'est pas explorée.

Notons qu'historiquement, un des premiers à réaliser des expériences de réservoir accéléré est Read (1984). Des couches de mélange ont été étudiées et le coefficient  $\alpha_b$  a été mesuré constant d'une expérience à l'autre.

#### 1.2.5 Rayleigh-Taylor et expériences laser

D'autres types d'expériences ont lieu en conditions plus proches des applications. Les hypothèses de géométrie cartésienne et d'accélération constante ne sont pas prises. Une capsule sphérique, ou circulaire dans le cas d'expériences 2D, est comprimée dans les mêmes conditions que les expériences réelles de fusion par confinement inertiel. Étant souhaitable de réduire au maximum le développement de l'instabilité pour ce type d'applications, des essais sur différents schémas de capsules sont menés. Huser *et al.* (2011) ont ainsi réduit la croissance de l'instabilité de Rayleigh-Taylor en remplaçant l'ablateur homogène par un empilement de couches de plastique dopé et non dopé.

Ce manuscrit étant centré sur l'étude en géométrie cartésienne et en accélération constante de l'instabilité, il ne sera pas donné plus de détails sur ces expériences.

### 1.3 Études numériques

#### 1.3.1 Considérations générales

Des approches très diverses ont été tentées pour la simulation numérique de l'instabilité de Rayleigh-Taylor (Livescu, 2013). L'hypothèse de milieu continu est la plus souvent retenue, même si on note quelques travaux exotiques (en approche particulaire notamment). En ce qui concerne les simulations s'appuyant sur les équations de Navier-Stokes ou d'Euler, on relève deux axes d'approximations. Le premier concerne les modèles physiques, qui vont du compressible jusqu'à l'incompressible de type Boussinesq. Le second concerne la turbulence, tantôt

traitée sans modèle (simulations DNS), tantôt avec modèles, qui peuvent être numériques ou physiques. Quant aux méthodes numériques, elles sont diverses, depuis les différences finies de bas ordre, jusqu'aux simulations spectrales Fourier-Fourier (horizontalement) et Chebyshev (verticalement), qui correspond à une très grande précision numérique.

#### 1.3.2 Simulations moléculaires

Kadau et al. (2004) réalise des simulations à base de particules pour l'étude de différents phénomènes. Il s'est intéressé à l'instabilité de Rayleigh-Taylor. L'interaction entre particules pour une situation miscible est régie par le potentiel de Lennard-Jones  $\phi^{LJ}(r) = \varepsilon [(r_0/r)^{12} - \varepsilon]$  $2(r_0/r)^6$ ] lorsque r est plus faible que le point d'inflexion, et par un potentiel cubique au-delà. L'énergie de liaison est notée  $\varepsilon$  et sa longueur  $r_0$ . Des simulations effectuées en 2004 mettent en jeu 100 millions de particules. Différents nombres d'Atwood ont été testés, tandis que la gravité a été suffisante pour générer une stratification modérée. Les simulations Navier-Stokes ont besoin d'une perturbation pour amorcer la croissance de l'instabilité. En effet, une interface parfaitement plane est un état d'équilibre instable dans la majorité des cas réels. Dans les expériences, des perturbations d'origine vibratoire ou thermique déclenchent la croissance de l'instabilité. En simulation numérique de type Navier-Stokes, ces perturbations doivent être ajoutées manuellement, sans quoi l'état initial reste à l'équilibre. Les simulations moléculaires échappent à ce phénomène. En effet, les fluctuations thermiques capturées par les équations utilisées suffisent à déclencher la croissance de l'instabilité. Souhaitant étudier un écoulement turbulent malgré l'échelle de taille de boîte très réduite, les paramètres physiques qui correspondent à la viscosité sont bien plus faibles que pour les simulations Navier-Stokes usuelles. En conséquence, l'échelle de Kolmogorov est du même ordre de grandeur que l'échelle des fluctuations thermiques. Il est donc observé des écarts importants avec les résultats de simulations continues. Néanmoins, moyenner un nombre important de simulations supprime cet effet car les fluctuations thermiques sont aléatoires. Des résultats plus cohérents avec les simulations continues sont alors retrouvés.

#### 1.3.3 Simulations Lattice-Boltzmann

Divers progrès ont permis l'émergence de simulations Lattice-Boltzmann pour l'instabilité de Rayleigh-Taylor (Shan & Chen, 1993; Lee & Lin, 2005). L'équation de Boltzmann n'est pas résolue intégralement, en pratique le mouvement des particules est restreint à un espace discrétisé (en temps et en espace). Les équations portent sur des densités de probabilité de présence de particules :

$$f_i(x + c_i\Delta_t, t + \Delta_t) = f_i(x, t) + \Omega_{ij} \left( f_j^{eq}(x, t) - f_j(x, t) \right), \qquad (1.2)$$

où  $f_i(x,t)$  désigne la probabilité de détecter une particule à la position x, au temps t et à la vitesse  $v_i = c_i$ . L'ensemble d'entiers  $i \in [1, n]$  désigne un ensemble de noeuds connectés. Différentes grilles de connectivité peuvent être envisagées. Un exemple consiste à relier le point central d'un cube aux milieux des arêtes et des faces, soit 19 points au total. La fonction d'équilibre local est  $f_j^{eq}$ , tandis que  $\Omega_{ij}$  représente le terme de collision. Un des modèles les plus simples et fréquemment utilisé est le modèle Bhatnagar-Gross-Krook (Bhatnagar *et al.*, 1954). Il a l'inconvénient d'imposer une même diffusivité pour la masse, la quantité de mouvement et l'énergie. Notons que les grandeurs physiques (vitesse, masse volumique, etc.) sont obtenues par sommations diverses sur la fonction  $f_i$ .

Des simulations jusqu'à des nombres d'Atwood modérés et en présence de stratification ont été réalisées (Scagliarini *et al.*, 2010). Des efforts permettant des diffusivités différentes pour masse, quantité de mouvement et énergie sont en cours (McCracken & Abraham, 2005) mais n'ont pas encore été appliqués à l'écoulement Rayleigh-Taylor.

#### 1.3.4 Simulations Euler et Navier-Stokes

#### 1.3.4.1 Généralités

Les simulations de l'instabilité de Rayleigh-Taylor s'appuyant sur les équations de Navier-Stokes ou d'Euler sont les plus nombreuses (voir tables 1.1 et 1.2).

Modèle physique	DNS	LES OU MILES
Incompressible	Joly <i>et al.</i> (2005)	Ramaprabhu & Andrews $(2004b)$
Euler		Ramaprabhu et al. (2005)
$(\operatorname{div}\vec{u}=0)$		Ramaprabhu & Dimonte (2005)
Boussinesq	Young <i>et al.</i> (2001)	
Navier-Stokes	Ristorcelli & Clark (2004)	
$(\operatorname{div} \vec{u} = 0)$	Vladimirova & Chertkov (2009)	
	Boffetta et al. (2010)	
	Schneider & Gauthier $(2015c)$	
Bas nombre de		Bell <i>et al.</i> (2004)
Mach Euler		Zingale $et al.$ (2005)
Modèle de Sandoval	Cook & Dimotakis (2001)	Cook & Cabot (2004)
$(\operatorname{div} \vec{u} \neq 0)$	Joly <i>et al.</i> (2005)	Cook <i>et al.</i> (2004)
	Cabot & Cook $(2006)$	
	Livescu & Ristorcelli (2008)	
	Mueschke & Schilling $(2009a, b)$	
	Zhang & Tan (2009)	
	Livescu et al. (2011)	
	Cabot & Zhou (2013)	
Anélastique	Schneider & Gauthier (2015b)	
$(\operatorname{div}\rho_o \vec{u} = 0)$	Schneider et al. (2015)	

TABLE 1.1 - Contributions aux simulations numériques Rayleigh-Taylor. Modèles incompressibles et à bas nombre de Mach.

Les contributions proviennent de communautés diverses. Certaines simulations sont motivées par l'étude des supernovas, et souvent réalisées en symétrie sphérique avec une explosion

Modèle physique	DNS	LES OU MILES
Euler	Ofer <i>et al.</i> (1992)	Youngs (1984, 1991, 2013)
Compressible	Li (1993, 1996)	Linden $et al.$ (1994)
	Hecht <i>et al.</i> (1995)	Anuchina et al. (2000)
	Shvarts et al. (1995)	Dalziel et al. (1999)
	Alauzet et al. (2004)	Sin'kova, O.G. $et al.$ (1999)
		Inogamov & Oparin (1999)
		Belotserkovskii & Oparin (1999)
		Glimm <i>et al.</i> (2001)
		Calder $et al.$ (2002)
		George & Glimm (2005)
		Jin et al. (2005)
		Liu et al. (2006)
Navier-Stokes	Gauthier (1988, 1991)	Mellado et al. (2005)
Compressible	Gauthier et al. (1996, 2005)	Olson & Cook (2007)
	Renaud & Gauthier (1997)	
	Fournier et al. (2001)	
	Gauthier $(2013)$	

TABLE 1.2 – Contributions aux simulations numériques Rayleigh-Taylor. Modèle compressible.

du système. D'autres sont liées à l'étude de la fusion par confinement inertiel et mettent en jeu une implosion. Enfin, d'autres se positionnent d'une façon plus générale, en géométrie cartésienne. C'est le cas de la présente thèse.

On distingue une première classification possible des études numériques : DNS et les autres. Les objectifs et la philosophie de ces deux catégories ne sont pas les mêmes. Les DNS ont vocation à être des références en terme de simulation. La précision et l'exactitude des équations résolues sont au cœur de la motivation, l'inconvénient étant le temps de calcul. Souvent, les DNS Rayleigh-Taylor correspondent, en terme de grille de points ou de Reynolds, à des simulations LES effectuées quelques années auparavant. Le but poursuivi est l'obtention de résultats auxquels le moins possible de doutes ou d'imprécisions sont rattachés. Enquêter sur les petites échelles de turbulence et de mélange, deux phénomènes essentiels dans le développement d'une couche de mélange Rayleigh-Taylor, est l'une des motivations de telles simulations. Elles peuvent aussi servir à valider (ou invalider) des modèles. Les simulations LES intègrent un modèle de turbulence pour les petites échelles et donc une imprécision, qui est néanmoins quantifiable. Elles restent bien meilleures que les modèles RANS utilisés dans le passé.

En terme de méthode numérique, les choix naturels qui accompagnent l'exigence de précision des DNS sont les méthodes spectrales. Complexes à utiliser dans les géométries nontriviales, elles s'adaptent très bien à la dimension horizontale périodique de la boîte de simulation (méthode de Fourier). Dans la direction verticale inhomogène, il est possible d'utiliser les polynômes de Chebyshev. C'est le cas des simulations réalisées dans le cadre de cette thèse, la grille de points de collocation étant découpée verticalement en sous-domaines sur lesquels sont effectuées des décompositions Chebyshev. D'autres études font le choix d'accompagner les décompositions de Fourier horizontales par un schéma aux différences finies d'ordre élevé (8 ou 10) dans la direction verticale. Moins coûteuses, elles sont aussi moins précises.

La majorité des simulations récentes à grand Reynolds et possédant un milliard de points ou plus sont effectuées avec une décomposition de Fourier pour les directions horizontales. On relève quelques rares exceptions, utilisant des méthodes locales, volumes finis ou différences finies, dans les trois directions. Voir par exemple les simulations effectuées parYoungs (2013). Dans ces situations, les petites échelles sont éliminées par dissipation numérique. Les caractéristiques macroscopiques de la croissance de l'instabilité, comme la relation auto-semblable  $h = h(t^2)$  sont tout de même obtenues. Comme on peut s'y attendre cependant, aux petites échelles les caractéristiques de la turbulence ou du mélange sont sensiblement différentes de celles obtenues par méthodes spectrales (Youngs, 2014).

Un autre axe de différentiation des simulations est le modèle physique utilisé. Le modèle compressible est extrêmement coûteux en raison de la propagation des ondes sonores. Il capture néanmoins plusieurs phénomènes de compressibilité qui ont une influence visible sur la croissance de l'instabilité. Le premier est lié au nombre d'Atwood. Dès que celui-ci n'est pas petit devant 1, on observe une asymétrie entre les deux moitiés de la couche de mélange, les bulles étant plus larges que les aiguilles. Il s'agit d'un phénomène de compressibilité dynamique qui n'est pas capté par tous les modèles. Le deuxième effet est lié à la stratification des fluides : il s'agit de la saturation de la croissance de la couche de mélange, expliquée au début de ce chapitre. À ma connaissance, le modèle compressible est le seul à capturer cet effet, lorsque la stratification a la gravité pour origine. Enfin, on peut observer dans certaines conditions la formation d'une onde de choc dans le fluide lourd au repos (Olson & Cook, 2007). Ce dernier effet n'est logiquement pas observable avec les modèles bas nombre de Mach, ceux-ci éliminant les ondes acoustiques qui restreignent trop le pas de temps.

S'il paraît difficile de capter l'effet de saturation avec un modèle différent des équations de Navier-Stokes compressibles, il est plus aisé d'obtenir l'asymétrie bulles-aiguilles. Le modèle de Boussinesq n'en rend pas compte, étant restreint aux nombres d'Atwood petits devant 1. Ce cas de figure se rencontre peu souvent dans la fusion par confinement inertiel, mais la configuration de Boussinesq est probablement le seul modèle physique établi à partir des premiers principes à mettre en évidence un régime de croissance auto-semblable non borné en temps.

Sandoval (1995), a établi dans sa thèse un modèle proche de l'approximation de Boussinesq, qu'on appellera modèle de Sandoval dans la suite. Le champ de vitesse n'est plus solénoïdal, et l'asymétrie bulles-aiguilles peut être capturée. Ce modèle semble valide pour tout nombre d'Atwood. Des simulations à nombre d'Atwood modéré ou important ont été menées (voir table 1.1).

Les premières simulations anélastiques en trois dimensions de l'instabilité de Rayleigh-Taylor sont présentées dans ce manuscrit. Les effets de compressibilité de température sont étudiés. Notons que les modèles de type anélastique, qui se caractérisent par une équation de contrainte du type div $(\tilde{\rho}u) = 0$  où  $\tilde{\rho}(z)$  est un profil moyen de masse volumique, ont déjà été utilisés pour l'étude d'autres phénomènes que l'instabilité de Rayleigh-Taylor. Citons par exemple Ogura & Phillips (1962); Gough (1969); McLaughlin *et al.* (2003); Bannon *et al.*  (2006); Barranco & Marcus (2006); Durran (2008) pour la convection thermique.

Le dernier modèle physique évoqué dans cette thèse est le modèle quasi-isobare. Déjà utilisé en convection thermique par Fröhlich J., Laure P. and Peyret R. (1992), il est établi pour la première fois dans le cadre Rayleigh-Taylor et est valide pour des écoulements non stratifiés.

#### 1.3.4.2 Problématiques liées à la grille de points

La gestion de la grille de points de collocation est un problème épineux des simulations Rayleigh-Taylor. L'idée la plus simple est de créer une grille qui reste fixe tout au long du calcul. Elle peut devenir insuffisante de trois façons : parce que les petites échelles turbulentes ont atteint le raffinement de la grille de points, parce que les structures des frontières de la couche de mélange atteignent les parois supérieure ou inférieure du domaine de simulation, et parce que la taille horizontale est trop faible (confinement lié à la périodicité). De plus, dans la première partie de la simulation, de très nombreux points sont utilisés pour capturer du fluide au repos, ce qui n'est pas optimal.

Une amélioration consiste à commencer la simulation avec un faible nombre de points, et d'en rajouter aux extrémités à mesure que la couche de mélange s'épaissit, le tout à densité de points constante. Dans cette situation, on s'affranchit d'une des limitations possibles de la grille, il reste celle des petites échelles turbulentes et le problème du confinement horizontal.

Une dernière méthode, employée dans ce manuscrit, consiste à autoriser les points de la grille à se déplacer. Ils commencent concentrés autour du gradient initial lié au saut de masse volumique. Tandis que la couche mélange s'épaissit, ils s'éloignent les uns les autres. On s'assure que la proportion de points captant les fluides au repos est minimale. À mesure que les points s'éloignent les uns des autres, la densité diminue, alors que la turbulence fait apparaître des échelles de plus en plus petites. Il est donc avisé d'accompagner ce processus d'une méthode de raffinement de grille, l'idéal étant une méthode automatique. Celle-ci est appelée AMR pour Adaptive Mesh Refinement (Berger & Oliger, 1984; Berger & Colella, 1989). Le code utilisé pendant cette thèse s'est doté d'une procédure manuelle de raffinement, bon compromis entre temps de développement et conservation d'une grille optimale de points pendant la simulation. Cette méthode ne conserve qu'une limitation possible en terme de grille : le confinement horizontal qui survient nécessairement à un certain instant.

En conclusion, on a présenté dans ce chapitre le scénario général de développement d'une couche de mélange Rayleigh-Taylor, avant de détailler les différentes méthodes expérimentales et numériques utilisées pour l'étude de cette instabilité.

Les perspectives et domaines inexplorés peuvent être discriminés suivant deux axes. Le premier est la transition de mélange. Atteinte en LES et en DNS, il reste à étudier en détail son impact sur la croissance de la couche de mélange pour les différents modèles physiques présentés. Le deuxième axe est lié aux paramètres d'Atwood et de stratification. Les études numériques réalisés à grande stratification montrent une turbulence modérément intense. Il reste à observer une saturation à grand Atwood et nombre de Reynolds turbulent élevé. La transition de mélange pourrait ainsi accélérer sensiblement la décroissance de l'écoulement à la saturation du fait d'un processus de mélange bien plus efficace.

# CHAPITRE 2 Modèles physiques pour l'instabilité de Rayleigh-Taylor

### Sommaire

<b>2.1</b>	L'ins	stabilité de Rayleigh-Taylor pour des fluides newtoniens	26
	2.1.1	Adimensionnement des équations de Navier-Stokes	27
	2.1.2	Stratification et équations du système Rayleigh-Taylor	28
		2.1.2.1 Capacités thermiques	29
		2.1.2.2 État initial	30
		2.1.2.3 État final	30
	2.1.3	Analyse asymptotique	31
2.2	L'ap	proximation anélastique	<b>31</b>
<b>2.3</b>	L'ap	proximation quasi-isobare	35
	2.3.1	Limite Boussinesq des équations quasi-isobares	37
2.4	Le n	nodèle de Sandoval	38
	2.4.1	Établissement historique du modèle	39
	2.4.2	Établissement rigoureux du modèle	39
	2.4.3	Limite Boussinesq des équations de Sandoval	41
<b>2.5</b>	L'ap	proximation de Boussinesq	<b>42</b>
	2.5.1	Établissement des équations de Navier-Stokes	42
2.6	Disc	ussion sur les modèles physiques	44
	2.6.1	Récapitulatif	44
	2.6.2	Domaines de validité	45
2.7	Ĕqu	ations de transport de la vorticité	47
	2.7.1	En régime compressible	47
	2.7.2	En approximation anélastique	48
		2.7.2.1 Prise du rotationnel de l'équation anélastique de conservation de	10
		la quantite de mouvement	49
		2.7.2.2 Developpement asymptotique de l'equation compressible de trans-	51
	273	En approximation de Boussinesa	53
	2.1.0	2731 Prise du rotationnel de l'équation de Boussinese de conservation	00
		de la quantité de mouvement	53
		2.7.3.2 Développement asymptotique de l'équation compressible de trans-	
		port de la vorticité	55
2.8	Équ	ations de transport de l'énergie cinétique turbulente	<b>57</b>
	2.8.1	En régime compressible	57
	2.8.2	En approximation anélastique	57
	2.8.3	En approximation de Boussinesq	58

2.8.3.1	Calcul direct à partir de l'équation de Boussinesq de conservation	
	de la quantité de mouvement	58
2.8.3.2	Développement asymptotique de l'équation compressible de trans-	
	port de l'énergie cinétique turbulente	59

Ce chapitre est dédié à la présentation du système étudié. Les hypothèses physiques retenues et l'état initial de l'instabilité sont décrits. L'établissement des modèles physiques anélastique, quasi-isobare, de Sandoval et de Boussinesq par la méthode des développements asymptotiques dans le cadre Rayleigh-Taylor est ensuite réalisé. Les domaines de validité et propriétés physiques des modèles physiques obtenus ainsi que du système complet Navier-Stokes compressible sont discutés. Pour les modèles anélastique et de Boussinesq, les équations de transport de la vorticité et de l'énergie cinétique turbulente sont calculées par deux méthodes différentes, les résultats trouvés étant identiques. Les termes baroclines, légèrement dégénérés, sont comparés au modèle compressible. Une partie des éléments développés dans ce chapitre a été publiée (Schneider & Gauthier, 2015a).

## 2.1 L'instabilité de Rayleigh-Taylor pour des fluides newtoniens

On considère ici le mélange de deux fluides newtoniens en approximation mono-fluide. Décrivons d'abord le modèle thermodynamique de mélange. L'expression des pressions partielles est :  $p_{H,L} = \rho_{H,L} \left( \mathcal{R} / \mathcal{M}_{H,L} \right) T_{H,L}$  où  $\rho_{H,L}$  et  $T_{H,L}$  sont les masses volumiques et températures des fluides (les indices H, L correspondent respectivement aux fluides lourd et léger). Le modèle classique de mélange utilisé met en jeu les pressions et masses volumiques partielles. Les grandeurs thermodynamiques sont décomposées :  $p = p_H + p_L$ ,  $\rho = \rho_H + \rho_L$  et  $T = T_H = T_L$ , où  $p, \rho$  et T sont la pression, la masse volumique et la température du fluide considéré. La concentration en fluide lourd est également introduite :  $c = \rho_H / \rho$ . Les capacités thermiques massiques à volume constant et pression constante sont notées  $C_{v,p;H,L}$ . Leurs quotients, les indices adiabatiques des fluides lourd et léger, est noté  $\gamma_{H,L}$ . L'écoulement est contenu dans un parallélépipède rectangle clos  $\Omega = L_x \times L_y \times L_z$   $(L_z \equiv h_H - h_L, \text{ où } |h_H| \text{ et } |h_L| \text{ sont}$ respectivement les hauteurs de fluide lourd et de fluide léger. Le fluide lourd est initialement positionné dans la partie haute du domaine, tandis que le fluide léger est localisé en bas. La cote z = 0 sépare les deux fluides. Pour un écoulement de deux fluides newtoniens miscibles, les équations complètes de Navier-Stokes s'écrivent (Hirschfelder et al., 1954, Chap 11) avec la prise en compte du terme d'enthalpie (Cook, 2009).

$$\partial_t \rho + \partial_j \rho \, u_j = 0,$$
  

$$\partial_t \rho \, u_i + \partial_j \rho \, u_i \, u_j = -\partial_i p + \partial_j \sigma_{ij} - g \, \rho \, \delta_{i3},$$
  

$$\partial_t \rho \, e + \partial_j \rho \, u_j \, e = -p \, \partial_i u_i + \sigma_{ij} \, D_{ij} - \partial_i q_i,$$
  

$$\partial_t \rho \, c + \partial_j \rho \, u_j \, c = \partial_i [(\rho \, \mathcal{D}) \, \partial_i c],$$
  
npagné de l'équation d'état du fluide  

$$p = \mathcal{R} \, \mathcal{M}_r^{-1} \, \rho \, T \, (1 + r_{\mathcal{M}} - 2 \, r_{\mathcal{M}} \, c) \,.$$
(2.1)

Ce système explicite les équations de continuité, de conservation de la quantité de mouvement, de conservation de l'énergie, de concentration et l'équation d'état, dans cet ordre. L'équation de conservation de la quantité de mouvement contient le terme de flottabilité  $-g \rho \delta_{i3}$ , où g est

accon

l'accélération de la gravité. La fonction de dissipation de l'équation de conservation de l'énergie s'écrit  $\sigma_{ij} D_{ij}$ . Le flux de chaleur est  $q_i = +h_{\alpha} J_{\alpha i} - \kappa \partial_i T$ ,  $(\alpha = H, L)$  où  $h_{\alpha}$  est l'enthalpie de l'espèce  $\alpha$ , et  $J_{\alpha i} = -\rho \mathcal{D} \partial_i c_{\alpha}$  est le flux massique de diffusion. La première contribution au flux de chaleur est le flux d'enthalpie partielle, la seconde contribution provient de la loi de Fourier. On définit également  $2/\mathcal{M}_r = 1/\mathcal{M}_H + 1/\mathcal{M}_L$  et  $r_{\mathcal{M}} = (\mathcal{M}_H - \mathcal{M}_L)/(\mathcal{M}_H + \mathcal{M}_L)$  où  $\mathcal{M}_{H,L}$  sont les masses molaires des fluides lourd et léger. Pour un mélange binaire, l'expression du flux de chaleur est

$$q_i = -\Delta_{H,L} T\left(\rho \mathcal{D}\right) \partial_i c - \kappa \partial_i T, \qquad (2.2)$$

où la différence des chaleurs massiques à pression constante des deux espèces est  $\Delta_{H,L} = C_{p\,H} - C_{p\,L}$ . Les composantes de vitesse sont notées  $u_i$ , (i = 1, 2, 3). Le tenseur des contraintes,  $\sigma_{ij} = \mu(\partial_j u_i + \partial_i u_j - 2/3 \, \delta_{ij} \, \partial_\ell u_\ell)$ , est défini dans le cadre de l'approximation de Stokes, où  $\mu$  est le coefficient de viscosité dynamique. Le tenseur de taux de déformation est  $D_{ij} = 1/2 (\partial_j u_i + \partial_i u_j)$ . Le mélange est décrit par l'équation d'advection-diffusion de concentration du système (2.1). Cette équation est linéaire en c, cependant c est présent dans l'expression de l'équation d'état. Finalement, les dimensions des coefficients de transport  $[\mathcal{D}]$  et  $[\kappa/\rho C_p]$ sont  $L^2 T^{-1}$ . Ces coefficients de transport  $\mu$ ,  $\kappa$  et  $\mathcal{D}$  peuvent varier en fonction de la masse volumique  $\rho$ , de la concentration c et de la température T.

Le système (2.1) d'équations aux dérivées partielles est partiellement parabolique, l'équation de continuité étant de type hyperbolique. Il doit être complété par un jeu de conditions initiales et de conditions aux limites. Strikwerda J.C. (1977) fournit le nombre requis de conditions aux limites, à partir d'un raisonnement basé sur le nombre d'ondes entrantes dans le domaine. Cependant, pour un domaine fermé, une équation parabolique ne requiert qu'une seule condition par frontière. Six conditions par frontière sont donc requises. Pour les parois supérieures et inférieures (murs avec glissement), des conditions aux limites de Dirichlet sont utilisées pour la vitesse verticale tandis que des conditions aux limites de Neumann sont retenues pour les composantes horizontales de la vitesse. Pour la température, des conditions de Dirichlet sont retenues pour la paroi inférieure T(0) = 1, et une condition homogène de Neumann s'applique pour la paroi supérieure. Aucune condition aux limites n'est nécessaire pour la masse volumique ou la pression. Pour toutes les grandeurs sauf la pression, des conditions initiales doivent être ajoutées. Rappelons que le système d'équations (2.1) contient différentes échelles de temps : l'échelle acoustique, l'échelle hydrodynamique, les échelles associées avec les coefficients de diffusion (de quantité de mouvement, d'espèce et de conduction thermique). Sans oublier, pour les couches de mélange turbulentes, l'échelle de temps de diffusion associée à l'épaississement de la couche de mélange. L'équation de propagation acoustique est obtenue à partir du système (2.1). Une linéarisation des équations autour d'un état uniforme isentropique fournit l'équation d'onde  $(\partial_{tt}^2 - c_s^2 \partial_{ii}^2) p' = 0$ , où p' est la fluctuation de pression et  $c_s$  la vitesse du son isentropique, définie par  $c_s^2 = (\partial p/\partial \rho)_s$ . Cette équation d'onde est une équation hyperbolique, ce qui signifie que les perturbations se propagent à la vitesse de phase  $c_s$ .

#### 2.1.1 Adimensionnement des équations de Navier-Stokes

Plusieurs systèmes d'unités seront utilisés au cours de ce chapitre, à travers le changement de variable suivant
où L est une grandeur caractéristique et U,  $\rho_r$  et  $T_r$  sont respectivement les valeurs de référence de la vitesse, de la masse volumique et de la température. Dans un premier temps, la vitesse de référence U n'est pas définie. Les équations de Navier-Stokes (2.1) s'écrivent alors :

$$\partial_t \rho + \partial_j (\rho \, u_j) = 0, \tag{2.4a}$$

$$\rho\left(\partial_t u_i + u_j \,\partial_j u_i\right) = -\frac{1}{\gamma_r \,Ma^2} \partial_i p + \frac{1}{Re} \,\partial_j \sigma_{ij} - \frac{1}{Fr} \,\rho \,\delta_{i3},\tag{2.4b}$$

$$\rho\left(\partial_{t}e + u_{i}\,\partial_{i}e\right) = -\left(\gamma_{r} - 1\right)p\,\partial_{i}u_{i} + \left(\gamma_{r} - 1\right)\frac{\gamma_{r}\,Ma^{2}}{Re}\,\sigma_{ij}\,D_{ij} \\ + \frac{\gamma_{r} - 1}{Sc\,Re}\,\partial_{i}[\Delta_{H,L}^{\star}\,T\left(\rho\,\mathcal{D}^{\star}\right)\partial_{i}c] + \frac{\gamma_{r}}{Pr\,Re}\,\partial_{i}\left(\kappa^{\star}\,\partial_{i}T\right), \qquad (2.4c)$$

$$\rho\left(\partial_t c + u_j \,\partial_j c\right) = \frac{1}{Sc \,Re} \,\partial_i[(\rho \,\mathcal{D}^\star) \,\partial_i c],\tag{2.4d}$$

$$p = \rho T (1 + At - 2 At c), \qquad (2.4e)$$

où  $\gamma_r$  est une valeur de référence du rapport des capacités thermiques massiques, définie à la section 2.1.2.1, et  $\Delta_{H,L}^* = \Delta_{H,L}/C_{v,r}$ . Les quantités  $\mu^*$ ,  $\kappa^*$  et  $\mathcal{D}^*$  sont des fonctions adimensionnées de la masse volumique et de la température. Les expressions des nombres adimensionnées At, Ma, Re, Fr, Pr et Sc sont

$$At = \frac{\rho_H(z=0^+, t=0) - \rho_L(z=0^-, t=0)}{\rho_H(z=0^+, t=0) + \rho_L(z=0^-, t=0)}, \quad Ma = \frac{U}{c_s},$$
  

$$Re = \frac{UL}{\mu/\rho_r}, \quad Fr = \frac{U^2}{gL}, \quad Pr = \frac{\mu C_p}{\kappa}, \quad Sc = \frac{\mu}{D},$$
(2.5)

où  $D = \rho \mathcal{D}$ . On considère un mélange de deux fluides, le cas extrême At = 1 est donc exclu. De plus, l'équation de continuité de la pression à l'interface entre les fluides lourd et léger conduit à l'égalité  $At = r_{\mathcal{M}}$ . L'expression de l'énergie totale est  $E = u_i u_i + \gamma_r M a^2/(\gamma_r - 1) e - x_i \delta_{i3}$ . L'équation d'évolution de l'entropie est obtenue à partir de l'équation de Gibbs  $T dS = de + p dV - \overline{\mu} dc$ , où V est le volume massique et  $\overline{\mu}$  est le potentiel chimique du mélange,  $\overline{\mu} = \overline{\mu}_H / \mathcal{M}_H - \overline{\mu}_L / \mathcal{M}_L$ . Suivant Hirschfelder *et al.* (1954); Bazarov (1964), les potentiels chimiques des fluides lourd et léger sont notés  $\overline{\mu}_{H,L}$ . Adimensionnée, l'équation d'évolution de l'entropie devient :  $\rho T d_t S = \rho d_t e + (\gamma_r - 1) p \partial_i u_i + (\gamma_r - 1) \rho \overline{\mu} d_t c$ . Les sources d'irréversibilité sont donc les termes de conduction thermique, de diffusion visqueuse et de mélange (équation 2.4c).

#### 2.1.2 Stratification et équations du système Rayleigh-Taylor

Le système (2.4) est écrit sous une forme adaptée à une analyse asymptotique. Cependant, pour étudier l'écoulement Rayleigh-Taylor, il est plus pratique d'utiliser un système d'unités légèrement différent. La vitesse de référence est  $U = \sqrt{gL}$ . Le nombre de Froude Fr, est alors égal à 1 et un paramètre de stratification Sr, est introduit

$$\gamma_r M a^2 = \gamma_r \frac{g L}{c_s^2} = \frac{g L}{R T_r} = Sr,$$

avec  $R = \mathcal{R}/\mathcal{M}_r$ . Ce paramètre peut être écrit comme le rapport de la chute de pression hydrodynamique (sur la longueur L) sur la pression de référence thermodynamique :  $g L \rho_r / R T_r \rho_r = \Delta p / p_r$ . Sous cette forme, Sr apparaît clairement comme un paramètre de compressibilité. C'est également l'échelle de hauteur  $RT_r/g$  de la couche de fluide, utilisé ainsi en géophysique et en astrophysique.

Les équations de Navier-Stokes prennent alors la forme

$$\partial_t \rho + \partial_j (\rho \, u_j) = 0, \tag{2.6a}$$

$$\rho\left(\partial_t u_i + u_j \,\partial_j u_i\right) = -\frac{1}{Sr} \partial_i p + \frac{1}{Re} \,\partial_j \sigma_{ij} - \rho \,\delta_{i3},\tag{2.6b}$$

$$\rho\left(\partial_{t}e + u_{i}\,\partial_{i}e\right) = -\left(\gamma_{r} - 1\right)p\,\partial_{i}u_{i} + \left(\gamma_{r} - 1\right)\frac{Sr}{Re}\,\sigma_{ij}\,D_{ij}$$

$$+ \frac{\gamma_{r} - 1}{2}\partial_{i}\left[\Delta^{\star} - T\left(c,\mathbf{D}^{\star}\right)\partial_{i}c\right] + \frac{\gamma_{r}}{Re}\,\partial_{i}\left(u^{\star},\partial_{i}T\right)$$
(2.6a)

$$+\frac{\gamma_r - 1}{Sc \, Re} \,\partial_i [\Delta_{H,L}^{\star} T\left(\rho \, \mathcal{D}^{\star}\right) \partial_i c] + \frac{\gamma_r}{Pr \, Re} \,\partial_i \left(\kappa^{\star} \,\partial_i T\right), \qquad (2.6c)$$

$$\rho\left(\partial_t c + u_j \,\partial_j c\right) = \frac{1}{Sc \,Re} \,\partial_i [(\rho \,\mathcal{D}^\star) \,\partial_i c],\tag{2.6d}$$

$$p = \rho T (1 + At - 2 At c),$$
 (2.6e)

On observe 9 paramètres physiques dans le système Navier-Stokes complet : At, Sr, Re, Sc, Pr,  $\gamma_{H,L}$  et les deux rapports de dimensions du domaine.

### 2.1.2.1 Capacités thermiques

L'additivité des variables thermodynamiques extensives permet d'écrire une relation pour la capacité thermique à volume constant :

$$C_{v,m}(c) = c C_{v,H} + (1-c) C_{v,L},$$
(2.7)

où l'indice m signifie que cette grandeur est calculée pour un mélange des fluides lourd et léger. Sous forme adimensionnée cette relation devient :

$$C_{v,m}(c) = (\gamma_r - 1) \left[ c \, \frac{1 - At}{\gamma_H - 1} + (1 - c) \, \frac{1 + At}{\gamma_L - 1} \right].$$
(2.8)

La capacité thermique à pression constante s'obtient d'une façon similaire. On peut alors obtenir une relation pour le coefficient adiabatique du mélange en fonction de la concentration c:

$$\gamma_m(c) = \frac{\mathcal{C}_{p,m}(c)}{\mathcal{C}_{v,m}(c)} = \frac{c N_- \gamma_H + (1-c)N_+ \gamma_L}{c N_- + (1-c)N_+},$$
(2.9)

où  $N_{\pm} = (1 \pm \Gamma)(1 \pm At)$ . Plutôt que d'utiliser des rapports de  $\gamma_{H,L} - 1$ , on introduit le nombre d'Atwood des coefficients adiabatiques, c'est-à-dire :

$$\frac{\gamma_H - 1}{\gamma_L - 1} = \frac{1 + \Gamma}{1 - \Gamma}, \qquad \text{où} \qquad \Gamma = \frac{(\gamma_H - 1) - (\gamma_L - 1)}{(\gamma_H - 1) + (\gamma_L - 1)}.$$
(2.10)

On peut alors écrire :

$$\gamma_m(c) = \frac{c \left(1 - At\right)(1 - \Gamma) \gamma_H + (1 - c)(1 + At)(1 + \Gamma) \gamma_L}{c \left(1 - At\right)(1 - \Gamma) + (1 - c)(1 + At)(1 + \Gamma)}.$$
(2.11)

On choisit comme valeur de référence de la concentration  $c_r = (1 - At)/2$ , et la valeur de référence du coefficient adiabatique est telle que  $\gamma_r = \gamma_m(c_r)$ .

L'écart entre les capacités thermiques à pression constante des fluides lourd et léger est exprimée par :

$$\Delta_{H,L}^{\star} \equiv \frac{\mathcal{C}_{p,H} - \mathcal{C}_{p,L}}{\mathcal{C}_{v,r}} = \frac{\gamma_H}{\gamma_H - 1} (1 - At) - \frac{\gamma_L}{\gamma_L - 1} (1 + At).$$
(2.12)

Pour  $\gamma_H = \gamma_L = \gamma_r$ , on a  $\Delta_{H,L}^{\star} = -2At \frac{\gamma_r}{\gamma_r - 1}$ .

## 2.1.2.2 État initial

L'état initial est l'état d'équilibre hydrodynamique obtenu depuis les équations (2.6) pour  $u_i = 0$  et  $\partial_t = 0$  (solution stationnaire)

$$Sr^{-1} d_z p_{H,L}^{(init)}(z) + \rho_{H,L}^{(init)}(z) = 0, \quad \text{avec} \quad d_{zz}^2 T^{(init)}(z) = 0, \quad (2.13)$$

accompagné de l'équation d'état (2.6e)

$$p^{(init)}(z) = \rho^{(init)}(z) T^{(init)}(z) [1 + At - 2At c^{(init)}(z)].$$
(2.14)

Le profil de masse volumique initiale est ainsi l'empilement potentiellement instable de deux couches de fluides exponentiellement stratifiée de façon stable. Il s'écrit

$$\overline{\rho}(z) = \overline{\rho}_H(z) + \overline{\rho}_L(z) = (1 + At) \exp(-Sr_H z)H_+(z)$$

$$+ (1 - At) \exp(-Sr_L z)H_-(z),$$
(2.15)

où

$$Sr_{H,L} = Sr/(1 \mp At)$$

et  $H_{\pm}(z) = (1 \pm H(z))/2$ , H(z) étant la fonction de Heaviside. La solution de l'équation d'énergie (2.6c) est simplement  $T^{(init)} = 1$  pour les conditions aux limites données précédemment. La concentration est obtenue par division  $c^{(ini)}(z) = \rho_H^{(ini)}(z)/\rho^{(ini)}(z)$ . La pression est calculée analytiquement depuis l'équation 2.13.

Notons que le paramètre Sr est appelé « paramètre de stratification », alors que les fluides lourd et léger subissent respectivement une stratification égale à  $Sr_{H,L}$ . La stratification du fluide lourd est ainsi plus forte que la stratification du fluide léger (voir figure 1.1). De plus, l'état initial d'équilibre donné par l'équation (2.15) n'est pas défini pour le cas limite At = 1car Sr ne peut pas être considéré nul. Notons que le cas exclu At = 1 correspond à un fluide lourd de masse volumique finie positionné au-dessus du vide. De manière générale, pour obtenir des valeurs raisonnables de  $Sr_{H,L}$  en présence d'un très grand nombre d'Atwood, il est nécessaire de compenser avec une petite valeur de Sr.

## 2.1.2.3 État final

Après le mélange des deux fluides, l'écoulement tend asymptotiquement vers un état d'équilibre qui ne dépend que de la coordonnée inhomogène z. Dans ce régime, les vitesses sont nulles et la masse volumique atteint un profil stationnaire et non-uniforme noté  $\rho^{(fin)}(z)$ . De la même façon, l'équation de concentration (2.6d) associée à des conditions aux limites de Neumann montre que la concentration c atteint asymptotiquement une valeur stationnaire uniforme notée  $c^{(fin)}$ . Cette valeur est simplement donnée par l'expression

$$c^{(fin)} = \frac{m_H}{m_H + m_L},$$
 (2.16)

où  $m_H$  et  $m_L$  sont respectivement les masses de fluide lourd et léger. Après utilisation de l'équation d'état (2.6e), l'équation de quantité de mouvement (2.6b) s'écrit

$$-Sr^{-1}(1 + At - 2At c^{(fin)}) d_z \rho^{(fin)}(z) = \rho^{(fin)}(z), \qquad (2.17)$$

la solution étant

$$\rho^{(fin)}(z) = \rho^{(fin)}(0) \exp(-\mathcal{S} z), \qquad (2.18)$$

où

$$S = Sr \left(1 + At - 2At c^{(fin)}\right)^{-1}.$$
(2.19)

La constante  $\rho^{(fin)}(0)$  est fixée en fonction de la masse totale de fluide  $m_H + m_L$ 

$$\rho^{(fin)}(0) = \frac{(m_H + m_L)S}{\exp(-S z_{bot}) - \exp(-S z_{top})}.$$
(2.20)

## 2.1.3 Analyse asymptotique

Dans cette section, le principe général du développement asymptotique est présenté. Les deux premiers modèles qui peuvent être obtenus depuis les équations en formulation compressible sont les modèles anélastique et quasi-isobare. Les équations de Navier-Stokes sont utilisées sous la forme (2.4), où la vitesse de référence U n'est pas précisée. Un développement asymptotique où le petit paramètre est  $\gamma_r$  Ma<sup>2</sup> fournit la base de calcul pour établir ces deux modèles à bas nombre de Mach. Les variables  $\rho$ , p, T, e, c,  $u_i$  sont décomposées en puissances de  $\gamma_r$  Ma<sup>2</sup>, par exemple

$$\rho = \rho^{(0)} + \gamma_r \operatorname{Ma}^2 \rho^{(1)} + (\gamma_r \operatorname{Ma}^2)^2 \rho^{(2)} + \dots$$
 (2.21)

Ces décompositions sont insérées dans le système (2.4) et une identification à chaque ordre de grandeur est réalisée. L'ordre 0 de la décomposition (2.21) dépend du modèle considéré et sera décrite dans chaque cas.

À l'ordre  $(\gamma_r \operatorname{Ma}^2)^{-1}$  et pour  $\gamma_r \operatorname{Ma}^2 \ll 1$ , le terme de pression est dominant. La contribution du terme visqueux est négligeable si

$$\frac{\gamma_r \operatorname{Ma}^2}{Re} \ll 1. \tag{2.22}$$

Cette condition est satisfaite pourvu que le nombre de Reynolds soit au moins d'ordre 1. Étant donné que cette thèse s'intéresse à des écoulements turbulents à grand nombre de Reynolds, il sera supposé que  $Re \gg 1$  et que la condition (2.22) est toujours satisfaite. Quant au terme de flottabilité, il est négligeable ou dominant suivant la valeur de  $\gamma_r \text{Ma}^2/\text{Fr} \equiv Sr$ .

- 1. Pour  $\gamma_r \operatorname{Ma}^2 \ll 1$  et Fr  $\ll 1$ , c'est-à-dire pour une stratification modérée  $Sr \sim O(1)$ , l'ordre (-1) conduit à  $Sr^{-1} \partial_i p^{(0)} = \rho^{(0)} \delta_{i3}$ , qui est l'équation de l'équilibre hydrostatique. C'est le régime de l'approximation anélastique.
- 2. Pour  $\gamma_r \operatorname{Ma}^2 \ll 1$  et Fr ~ O(1), c'est-à-dire pour une faible stratification,  $Sr \ll 1$ , l'ordre  $(\gamma_r \operatorname{Ma}^2)^{-1}$  conduit à  $\partial_i p^{(0)} = 0$ , soit  $p^{(0)} = p^{(0)}(t)$ . C'est le régime de l'approximation quasi-isobare.

Dans ces deux cas, la partie hyperbolique du système d'équations de Navier-Stokes (2.4) a été éliminée des équations, de même que les phénomènes acoustiques. Les trois modèles dérivés dans ce chapitre sont donc tous de nature elliptique : la vitesse est donnée par la solution d'un problème de Stokes, c'est-à-dire un problème différentiel pour la vitesse et la pression, associé à une contrainte de la forme  $\partial_i u_i = S$  (Guo *et al.*, 2013). L'évolution des scalaires est gouvernée par des équations paraboliques.

## 2.2 L'approximation anélastique

L'équation de continuité des approximations anélastiques s'écrit sous la forme (Chassaing *et al.*, 2002)

$$\partial_i(\widetilde{\rho}\,u_i) = 0,\tag{2.23}$$

où  $\tilde{\rho}$  est une masse volumique caractéristique. Pour l'étude de l'instabilité de Rayleigh-Taylor, différents profils de masse volumique sont envisageables. Cette section est dédiée à l'établissement de cette approximation pour laquelle le profil de masse volumique à l'état final (uniquement dépendant de z) est utilisé comme masse volumique d'ordre 0 de la décomposition (2.21). Les variables  $\rho$ , p, T, e, c et  $u_i$  sont écrites sous la forme

$$\rho(x, y, z, t) = \rho^{(0)}(z) + \gamma_r \operatorname{Ma}^2 \rho^{(1)}(x, y, z, t) + \dots$$

$$u_i(x, y, z, t) = u_i^{(0)}(x, y, z, t) + \gamma_r \operatorname{Ma}^2 u_i^{(1)}(x, y, z, t) + \dots$$
(2.24)

où  $\rho^{(0)}(z) = \rho^{(fin)}(z)$  et les variables thermodynamiques p, T, e et c sont décomposées de la même façon que la masse volumique. À l'ordre 0,  $(\gamma_r \operatorname{Ma}^2)^0$ , les décompositions (2.21) sont insérées dans l'équation de continuité (2.4a) et on obtient

$$\partial_i \left( \rho^{(0)} \, u_i^{(0)} \right) = 0, \tag{2.25}$$

puisque  $\rho^{(0)}$  est indépendant du temps. Au même ordre de grandeur, l'équation de quantité de mouvement est obtenue depuis l'équation (2.4b)

$$\rho^{(0)}(\partial_t u_i^{(0)} + u_j^{(0)} \partial_j u_i^{(0)}) = -\partial_i p^{(1)} + Re^{-1} \partial_j \sigma_{ij}^{(0)} - \frac{\gamma_r \operatorname{Ma}^2}{\operatorname{Fr}} \rho^{(1)} \delta_{i3}.$$
(2.26)

La pression qui intervient dans cette équation est la pression au premier ordre  $p^{(1)}$ , qui joue le rôle d'un multiplicateur de Lagrange et assure que la contrainte (2.25) est satisfaite. Au premier ordre en  $\gamma_r \text{Ma}^2$ , l'équation d'énergie (2.4c) s'écrit

$$\partial_{t}\rho^{(0)} e^{(1)} + \partial_{i}\rho^{(0)} u_{i}^{(0)} e^{(1)} = -(\gamma_{r}-1) p^{(1)} \partial_{i}u_{i}^{(0)} + \frac{\gamma_{r}-1}{Re} \sigma_{ij}^{(0)} D_{ij}^{(0)} + \frac{\gamma_{r}}{Pr Re} \partial_{i}(\kappa^{\star} \partial_{i}T^{(1)}) + \frac{\Delta_{H,L}^{\star}}{Sc Re} \partial_{i}[T^{(0)} (\rho^{(0)} \mathcal{D}^{\star}) \partial_{i}c^{(1)}].$$

$$(2.27)$$

De la même façon, à l'ordre 0 l'équation de concentration (2.4d) prend la forme

$$\rho^{(0)}(\partial_t c^{(0)} + u_j^{(0)} \,\partial_j c^{(0)}) = \frac{1}{Sc \, Re} \,\partial_i [(\rho^{(0)} \,\mathcal{D}^\star) \,\partial_i c^{(0)}], \tag{2.28}$$

Et à l'ordre 1, on obtient

$$\rho^{(0)}(\partial_t c^{(1)} + u_j^{(0)} \,\partial_j c^{(1)}) = \frac{1}{Sc \, Re} \,\partial_i [(\rho^{(0)} \,\mathcal{D}^\star) \,\partial_i c^{(1)}].$$
(2.29)

Au premier ordre, l'équation d'état (2.4e) fournit une équation pour les fluctuations de masse volumique  $\rho^{(1)}$ 

$$\frac{p^{(1)}}{p^{(0)}} = \frac{\rho^{(1)}}{\rho^{(0)}} + \frac{T^{(1)}}{T^{(0)}} - \frac{2 At c^{(1)}}{1 + At - 2 At c^{(0)}},$$
(2.30)

définie pour des nombres d'Atwood strictement plus petit que 1, At < 1. Cette restriction a déjà été énoncée concernant l'équation (2.15). De plus, l'équation (2.30) ayant été obtenue au moyen d'un développement à petit nombre de Mach, le domaine de validité de ce système d'équations anélastiques est restreint aux nombres d'Atwood sensiblement plus petits que 1. En effet, à grand nombre d'Atwood et en présence d'une stratification non-nulle, il est possible d'observer la formation d'une onde de choc (Olson & Cook, 2007). Ce phénomène n'est logiquement pas capturé par le modèle anélastique, qui est conçu pour éliminer l'acoustique.

**Renormalisation :** le facteur  $\gamma_r \operatorname{Ma}^2$  doit être éliminé des équations. Dans ce but, l'équation (2.26) est tout d'abord multipliée par  $\gamma_r \operatorname{Ma}^2$ , puis le changement de variables suivant est réalisé,

$$\gamma_r \operatorname{Ma}^2 \varphi^{(1)} \to \varphi^{(1)}, \qquad (2.31)$$

pour les quantités d'ordre 1 uniquement. Le résultat est ensuite divisé par  $\gamma_r \text{Ma}^2$ . L'équation de quantité de mouvement (2.26) s'écrit alors

$$\rho^{(0)}(\partial_t u_i^{(0)} + u_j^{(0)} \partial_j u_i^{(0)}) = -(\gamma_r \operatorname{Ma}^2)^{-1} \partial_i p^{(1)} + Re^{-1} \partial_j \sigma_{ij}^{(0)} - \operatorname{Fr}^{-1} \rho^{(1)} \delta_{i3}, \qquad (2.32)$$

Cette équation (2.32) est ici écrite sous forme dimensionnée et est maintenant adimensionnée comme cela a été fait pour le système (2.6) , avec  $U = \sqrt{gL}$  pour vitesse caractéristique. On obtient

$$\rho^{(0)}(\partial_t u_i^{(0)} + u_j^{(0)} \partial_j u_i^{(0)}) = -Sr^{-1} \partial_i p^{(1)} + Re^{-1} \partial_j \sigma_{ij}^{(0)} - \rho^{(1)} \delta_{i3}, \qquad (2.33)$$

associée à la contrainte  $\partial_i (\rho^{(0)} u_i^{(0)}) = 0$ . Le changement de variables (2.31) est également appliqué à l'équation d'énergie (2.27)

$$\partial_t \rho^{(0)} e^{(1)} + \partial_i \rho^{(0)} u_i^{(0)} e^{(1)} = -(\gamma_r - 1) p^{(1)} \partial_i u_i^{(0)} + \frac{\gamma_r}{Pr \, Re} \partial_i (\kappa^* \, \partial_i T^{(1)}) + (\gamma_r - 1) \frac{Sr}{Re} \sigma_{ij}^{(0)} D_{ij}^{(0)} + \frac{\Delta_{H,L}^*}{Sc \, Re} \partial_i [T^{(0)} (\rho^{(0)} \mathcal{D}^*) \partial_i c^{(1)}].$$
(2.34)

Les équations (2.28) et (2.29) sont sommées pour obtenir l'équation d'évolution de la concentration

$$\rho^{(0)}(\partial_t c + u_j^{(0)} \,\partial_j c) = \frac{1}{Sc \,Re} \,\partial_i(\rho^{(0)} \,\mathcal{D}^* \,\partial_i c).$$
(2.35)

Le changement d'échelle (2.31) est réalisé sur l'équation d'état (2.30). Etant donné que cette équation ne contient que des grandeurs d'ordre 1, elle garde la même forme. Après ces changements, les variables thermodynamiques totales s'écrivent

$$\rho = \rho^{(0)} + \rho^{(1)}, \qquad c = c^{(0)} + c^{(1)},$$

$$p = p^{(0)} + p^{(1)}, \qquad T = T^{(0)} + T^{(1)}.$$
(2.36)

#### Remarques

- Le modèle anélastique est défini par la donnée des équations de quantité de mouvement (2.33) associée à la contrainte (2.25), l'équation de concentration (2.35), l'équation pour l'énergie interne (2.34) ou pour la température (2.37), l'équation d'état (2.30) avec la décomposition des grandeurs thermodynamiques définie en équation (2.36). Notons que la fonction de dissipation apparaît dans l'équation d'énergie.
- 2. L'analyse asymptotique ne fournit pas d'information sur le domaine de validité en nombre d'Atwood. Cependant, l'expression du profil de masse volumique (2.15) montre que la stratification du fluide lourd augmente avec le nombre d'Atwood At et peut être très importante pour des grandes valeurs de nombre d'Atwood, même en présence d'une valeur modérée du paramètre de stratification Sr. En outre, l'équation d'état linéarisée (2.30) montre que la limite des grands nombres d'Atwood ne peut être considérée. Ceci suggère l'existence d'une borne supérieure de validité sur le nombre d'Atwood. Concernant la stratification, on a énoncé en 2.1.3 que  $Sr \sim O(1)$  dans le domaine

anélastique. Il existe donc des bornes inférieure et supérieure pour le paramètre de stratification. Ceci est cohérent avec la présence probable de phénomènes acoustiques pour des larges valeurs des paramètres de compressibilité  $Sr_{H,L}$ .

- 3. La décomposition de la pression, donnée par la relation (2.36), fait intervenir deux contributions différentes. La première est la pression thermodynamique  $p^{(0)}$ , il a été fait le choix de l'identifier avec la pression de l'état final homogène Rayleigh-Taylor. La pression  $p^{(1)}$  apparaît dans l'équation de quantité de mouvement et sa signification est double. Comme précédemment évoqué, il s'agit d'un multiplicateur de Lagrange qui assure le respect de la contrainte (2.25), de façon similaire aux écoulements de type incompressible. Cette pression  $p^{(1)}$  est également présente dans l'équation d'état (2.30) qui détermine la masse volumique au premier ordre  $\rho^{(1)}$ .
- 4. La conservation de la masse n'est pas garantie par le système d'équations présenté ici. Elle doit être imposée à chaque ordre de la décomposition (2.21). La loi de conservation  $\int \rho^{(n)} dV = 0$ , est obtenue depuis l'équation de continuité.
- 5. L'équation de quantité de mouvement (2.33) est invariante sous la transformation  $p^{(1)} \rightarrow p^{(1)} + \alpha p^{(0)}$ , où  $\alpha$  est une constante quelconque. En effet, les fluctuations de masse volumique qui apparaissent dans l'équation (2.33) peuvent être exprimées avec l'équation d'état (2.30). De cette façon, l'opérateur  $Sr^{-1}\partial_z \rho^{(0)}/p^{(0)}$  s'applique à la pression dynamique  $p^{(1)}$  et on constate l'invariance énoncée ci-dessus. Notons que l'équation d'état n'est pas invariante sous cette transformation. L'indétermination est levée par la conservation de la masse  $\int \rho^{(1)} dV = 0$ , qui se révèle être une équation pour la constante  $\alpha$ .
- 6. L'approximation anélastique a été établie sous l'hypothèse  $Sr \sim O(1)$ . En conséquence, la limite  $Sr \to 0$  ne peut être prise. En particulier, la limite des petites épaisseurs ne peut être considérée.
- 7. Il a été montré que le système d'équations anélastique est de type elliptique (Hammouch et al., 2013). Il requiert donc une condition aux limites par frontière pour les quantités gouvernées par des équations paraboliques : vitesses, énergie et concentration. La masse volumique et la pression ne nécessite aucune condition aux limites. Il convient d'ajouter des conditions initiales appropriées.
- 8. L'énergie totale, définie comme

$$E^{(0)} = \frac{1}{2} u_i^{(0)} u_i^{(0)} + \frac{e^{(1)}}{Sr(\gamma_r - 1)} + \frac{\rho^{(1)}}{\rho^{(0)}} x_i \delta_{i3}$$

vérifie une équation de conservation de la forme  $\partial_t \rho^{(0)} E^{(0)} + \partial_i [\rho^{(0)} u_i^{(0)} (E^{(0)} + Sr^{-1} p^{(1)} / \rho^{(0)}) + \Phi] = 0$ , où  $\Phi$  représente les flux associés aux contraintes visqueuses, au mélange et à la conduction thermique.

9. L'équation d'évolution de l'entropie est

$$\rho^{(0)} T^{(0)} d_t S^{(1)} = \rho^{(0)} d_t e^{(1)} + (\gamma_r - 1) p^{(1)} \partial_i u_i^{(0)} + (\gamma_r - 1) \overline{\mu}^{(0)} \rho^{(0)} d_t c^{(1)}.$$

Les sources d'irréversibilité sont les mêmes que pour les équations de Navier-Stokes complètes.

10. L'écart au champ de vitesse solénoïdal est proportionnel à la composante verticale de la vitesse, en effet  $\partial_i u_i^{(0)} = -u_3^{(0)} d_z \rho^{(0)} / \rho^{(0)}$ .

11. L'équation d'énergie (2.34) peut être réécrite comme une équation pour la température, en remarquant que

$$\rho^{(0)} d_t e^{(1)} = \rho^{(0)} C_v^{(0)} d_t T^{(1)} + \rho^{(0)} T^{(1)} d_t C_v^{(0)} + \rho^{(0)} T^{(0)} d_t C_v^{(1)},$$

ou

$$\rho^{(0)} d_t e^{(1)} = \rho^{(0)} C_v^{(0)} d_t T^{(1)} + \rho^{(0)} T^{(0)} d_c C_v d_t c^{(1)}, \qquad (2.37)$$

avec  $d_c C_v = (\gamma_r - 1) \left[ \frac{1 - At}{\gamma_H} - \frac{1 + At}{\gamma_L - 1} \right]$ . En utilisant l'expression (2.34) pour  $d_t e^{(1)}$ , on obtient l'équation pour les fluctuations de température  $T^{(1)}$ .

12. Neuf paramètres physiques sont présents dans le modèle anélastique, ce nombre est identique dans le cas compressible : At, Sr, Re, Sc, Pr et  $\gamma_{H,L}$  et les deux rapports de dimensions du domaine.

## 2.3 L'approximation quasi-isobare

Dans cette section, l'approximation quasi-isobare est établie. Comme montré dans à la section 2.1.3, elle est valide pour  $\gamma_r \operatorname{Ma}^2 \ll 1$ ,  $\operatorname{Fr} \sim O(1)$  et  $Sr \ll 1$ . Il a aussi été observé que la pression d'ordre 0,  $p^{(0)}$ , ne dépend que du temps. L'exposant (0) désigne dans cette section les quantités d'ordre 0 qui dépendent des trois coordonnées d'espace x, y, z et du temps t (à l'exception donc de la pression  $p^{(0)}(t)$ ). À l'ordre 0, l'équation de continuité (2.4a) s'écrit simplement

$$\partial_t \rho^{(0)} + \partial_j (\rho^{(0)} \, u_j^{(0)}) = 0. \tag{2.38}$$

Au même ordre, l'équation de quantité de mouvement (2.4b) s'écrit

$$\rho^{(0)} \left(\partial_t u_i^{(0)} + u_j^{(0)} \partial_j u_i^{(0)}\right) = -\partial_i p^{(1)} + \frac{1}{Re} \partial_j \sigma_{ij}^{(0)} - \frac{\rho^{(0)}}{\mathrm{Fr}} \delta_{i3}, \qquad (2.39)$$

où la pression d'ordre 1 apparaît. L'équation d'énergie (2.4c) peut être réécrite comme une équation pour la pression, grâce à la relation  $p = (\gamma_m(c) - 1)/(\gamma_r - 1)\rho e$ , où l'expression du rapport des capacités thermiques du mélange  $\gamma_m(c)$  est donnée par l'équation (2.11). On obtient

$$\partial_{t}p^{(0)} + u_{i}^{(0)} \partial_{i}p^{(0)} = -\gamma_{m} p^{(0)} \partial_{i}u_{i}^{(0)} + (\gamma_{m} - 1) \frac{\gamma_{r} \operatorname{Ma}^{2}}{Re} \sigma_{ij}^{(0)} D_{ij}^{(0)} + p^{(0)} \frac{\gamma_{m,c}}{\gamma_{m} - 1} \frac{1}{Sc \operatorname{Re}} \partial_{i}[(\rho^{(0)} \mathcal{D}^{\star}) \partial_{i}c^{(0)}] + (\gamma_{m} - 1) \frac{\Delta_{H,L}^{\star}}{Sc \operatorname{Re}} \partial_{i}[T^{(0)} (\rho^{(0)} \mathcal{D}^{\star}) \partial_{i}c^{(0)}] + \frac{\gamma_{m} - 1}{\gamma_{r} - 1} \frac{\gamma_{r}}{\operatorname{Pr} \operatorname{Re}} \partial_{i} \left(\kappa^{\star} \partial_{i}T^{(0)}\right),$$

$$(2.40)$$

où  $\gamma_{m,c}$  désigne la dérivée de  $\gamma_m$  par rapport à c. À l'ordre 0, la pression ne dépend que du temps t, de sorte que l'équation (2.40) n'est plus une équation aux dérivées partielles, mais plutôt une contrainte sur la divergence du champ de vitesse, qui s'écrit

$$\partial_{i}u_{i}^{(0)} = -\frac{1}{\gamma_{m}}\frac{d_{t}p^{(0)}}{p^{(0)}} + \frac{1}{\gamma_{m}-1}\frac{\gamma_{m,c}}{\gamma_{m}}\frac{1}{Sc\,Re}\partial_{i}[(\rho^{(0)}\mathcal{D}^{\star})\partial_{i}c^{(0)}] \\ + \frac{\gamma_{m}-1}{\gamma_{r}-1}\frac{\gamma_{r}}{\gamma_{m}}\frac{1}{p^{(0)}}\frac{1}{Pr\,Re}\partial_{i}[\kappa^{\star}\partial_{i}T^{(0)}] \\ + \frac{\gamma_{m}-1}{\gamma_{m}}\frac{1}{p^{(0)}}\frac{\Delta_{H,L}^{\star}}{Sc\,Re}\partial_{i}[(\rho^{(0)}\mathcal{D}^{\star})T^{(0)}\partial_{i}c^{(0)}].$$
(2.41)

Comparé à l'expression classique de la divergence du champ de vitesse pour le modèle quasiisobare établi pour la convection thermique, deux termes supplémentaires apparaissent. Ils sont associés à la diffusion d'espèces.

**Calcul de la pression**  $p^{(0)}(t)$  : La pression thermodynamique  $p^{(0)}(t)$  peut être calculée de deux manières : depuis l'expression de la divergence du champ de vitesse (2.41) ou grâce à l'équation d'état. Dans les deux cas, une intégrale sur tout le domaine est réalisée. L'expression (2.41) fournit une équation différentielle pour  $d_t p^{(0)}/p^{(0)}$  tandis que l'utilisation de l'équation d'état aboutit à une équation algébrique pour  $p^{(0)}$ ,

$$M = \int_{V} \rho^{(0)} dV = p^{(0)}(t) \int_{V} \frac{dV}{T^{(0)}(1 + At - 2At c^{(0)})},$$
(2.42)

où M est la masse totale de fluide.

En résumé, nous avons obtenu le système d'équations aux dérivées partielles suivant, qui constituent le modèle quasi-isobare. Il gouverne l'évolution de la masse volumique  $\rho^{(0)}$ , de la vitesse  $u_i^{(0)}$ , de la pression  $p^{(1)}$ , de l'énergie interne  $e^{(1)}$  et de la concentration  $c^{(0)}$ 

$$\rho^{(0)} \left(\partial_t u_i^{(0)} + u_j^{(0)} \partial_j u_i^{(0)}\right) = -\partial_i p^{(1)} + \frac{1}{Re} \partial_j \sigma_{ij}^{(0)} - \frac{\rho^{(0)}}{\mathrm{Fr}} \delta_{i3}, \qquad (2.43a)$$

associé à la contrainte sur  $\partial_i u_i^{(0)}$  donnée en équation (2.41)

$$\rho^{(0)} \left(\partial_t e^{(0)} + u_i^{(0)} \partial_i e^{(0)}\right) = -(\gamma_r - 1) p^{(0)} \partial_i u_i^{(0)} + \frac{\gamma_r}{Pr \, Re} \partial_i [\kappa^* \partial_i T^{(0)}] \qquad (2.43b)$$
$$+ \frac{\gamma_r - 1}{Sc \, Re} \partial_i [\Delta^*_{H,L} T^{(0)} \left(\rho^{(0)} \mathcal{D}^*\right) \partial_i c^{(0)}],$$
$$\rho^{(0)} \left(\partial_t c^{(0)} + u_j^{(0)} \partial_j c^{(0)}\right) = \frac{1}{Sc \, Re} \partial_i [(\rho^{(0)} \mathcal{D}^*) \partial_i c^{(0)}]. \qquad (2.43c)$$

Ce système est fermé par l'équation d'état à l'ordre 0

$$p^{(0)} = \rho^{(0)} T^{(0)} (1 + At - 2 At c^{(0)}).$$
(2.44)

## Remarques

- 1. Conséquence de l'hypothèse  $Sr \ll 1$ , le modèle quasi-isobare est restreint aux situations où les deux couches de fluide (lourd et léger) ne sont pas stratifiées. L'analyse asymptotique ne fournit pas de borne pour le nombre d'Atwood, on s'attend donc à ce que ce modèle soit valide pour de grandes valeurs du nombre d'Atwood.
- 2. L'équation de quantité de mouvement est soumise à la contrainte sur la divergence du champ de vitesse, en conséquence  $p^{(1)}$  est un multiplicateur de Lagrange. La résolution de ce problème différentiel conduit à un problème de Stokes généralisé puisque la divergence du champ de vitesse n'est pas nul.
- 3. La pression  $p^{(0)}$  est la contribution thermodynamique de la pression et est calculée depuis la conservation de la masse sous forme intégrale (2.42). L'équation de continuité n'est ici pas nécessaire.
- 4. Ce système d'équations aux dérivées partielles est également de nature elliptique et partage le même besoin de conditions aux limites que le modèle anélastique. En particulier, aucune condition aux limites n'est requise pour la pression et la masse volumique. Cependant, la contrainte (2.41) introduit un problème de compatibilité entre les conditions aux limites de vitesse et des grandeurs thermodynamiques (Fröhlich J., Laure P. and Peyret R., 1992). Enfin, il est nécessaire de préciser des conditions initiales.

5. Étant donné que la fonction de dissipation est d'ordre  $\gamma_r \text{Ma}^2$ , elle n'apparaît pas dans l'équation d'énergie. En conséquence l'énergie totale définie par

$$E^{(0)} = \frac{1}{2} u_i^{(0)} u_i^{(0)} + \frac{1}{\gamma_r - 1} e^{(0)} + \frac{x_i \,\delta_{i3}}{\text{Fr}},$$

ne satisfait pas d'équation de conservation. En effet, le terme de diffusion visqueuse enfreint cette loi.

6. L'équation d'évolution de l'entropie est

$$\rho^{(0)} T^{(0)} d_t S^{(0)} = \rho^{(0)} d_t e^{(0)} + (\gamma_r - 1) p^{(0)} \partial_i u_i^{(0)} + (\gamma_r - 1) \rho^{(0)} \overline{\mu}^{(0)} d_t c^{(0)}$$

les sources d'irréversibilité sont dues au mélange et à la conduction thermique.

- 7. De même que pour l'approximation anélastique, on note qu'il n'est plus possible d'obtenir une équation de propagation d'ondes pour une contribution de pression  $p^{(0)}$  ou  $p^{(1)}$ , ou pour la somme, en linéarisant le système (2.43).
- 8. Huit paramètres physiques apparaissent dans le modèle quasi-isobare : At, Re, Sc, Pr,  $\gamma_{H,L}$  et les deux rapports de dimensions du domaine.

## 2.3.1 Limite Boussinesq des équations quasi-isobares

Le modèle le plus simple pour la configuration Rayleigh-Taylor est étudié. Dans ce but, la limite des grands coefficients adiabatiques et des faibles nombres d'Atwood est prise. Les variables physiques sont donc décomposées sous la forme

$$u^{(0)} = u^{(0,0)} + At u^{(0,1)} + \dots$$

$$\rho^{(0)} = \rho^{(0,0)} + At \rho^{(0,1)} + \dots$$

$$T^{(0)} = T^{(0,0)} + At T^{(0,1)} + \dots$$

$$p^{(1)} = At^{-1} p^{(1,0)} + p^{(1,1)} + At p^{(1,2)} + \dots,$$
(2.45)

En particulier, cette décomposition montre que  $\rho^{(0,0)}$ , c'est-à-dire la masse volumique pour At = 0, est uniforme. Il est également imposé que le fluide soit incompressible, ce qui implique que la vitesse du son est infinie (Fröhlich J., 1990). Cela est équivalent à considérer que le rapport des capacités thermiques massiques est infini, c'est-à-dire  $\gamma \to \infty$ , avec  $C_v \to 0$  et  $C_p = O(1)$  (Zeytounian, 1990; Fröhlich J., 1990). Le système d'équations quasi-isobares (2.43) est réécrit en utilisant  $U = \sqrt{At g L}$  comme vitesse caractéristique (voir par exemple Trygg-vason, 1983). L'équation de continuité (2.38) écrite à l'ordre 0 montre le caractère solénoïdal du champ de vitesse  $\partial_i u_i = 0$ . L'équation de quantité de mouvement s'écrit

$$\rho^{(0)}(\partial_t u_i^{(0)} + u_j^{(0)} \partial_j u_i^{(0)}) = -\partial_i p^{(1)} + \frac{1}{Re} \partial_j \sigma_{ij}^{(0)} - \frac{1}{At} \rho^{(0)} \delta_{i3}, \qquad (2.46)$$

et l'équation d'énergie (2.43b) se réécrit

$$\rho^{(0)} \left(\partial_t e^{(0)} + u_i^{(0)} \partial_i e^{(0)}\right) = -\left(\gamma_r - 1\right) p^{(0)} \partial_i u_i^{(0)} + \frac{1}{\sqrt{At}} \frac{\gamma_r}{Pr \, Re} \partial_i [\kappa^* \, \partial_i T^{(0)}] + \frac{1}{\sqrt{At}} \frac{\gamma_r - 1}{Sc \, Re} \partial_i [\Delta^*_{H,L} \, T^{(0)} \left(\rho^{(0)} \, \mathcal{D}^*\right) \partial_i c],$$
(2.47)

où les nombres adimensionnés (2.5) sont maintenant

$$Re = \frac{UL}{\mu/\rho_r} = At^{1/2} \frac{g^{1/2} L^{3/2}}{\mu/\rho_r},$$
  

$$\gamma_r \operatorname{Ma}^2 = At \frac{gL}{RT_r} = At Sr, \quad \operatorname{Fr} = At.$$
(2.48)

La valeur de la masse volumique uniforme à l'ordre 0 est choisie :  $\rho^{(0,0)} = 1$ . En outre, l'équation d'énergie montre que la température  $T^{(0,0)}$  est uniforme. En effet, pour des valeurs élevées des coefficients adiabatiques  $\gamma$ , on a  $\Delta_{H,L}^{\star} = -2 At$  (voir équation 2.12). Le dernier terme de l'équation d'énergie (2.47) tend vers 0 quand le nombre d'Atwood est négligeable. En conséquence, le terme dominant de cette équation est le terme de diffusion de température, ce qui induit que le champ de température est uniforme. Avec la condition à la limite  $T^{(0)} = 1$ en bas du domaine, on en déduit l'indépendance par rapport au temps de la température.

De plus, la compressibilité devient négligeable,  $\tau_s = \rho^{-1} (\partial \rho / \partial p)_s = 0$ : étant donné que les coefficients adiabatiques  $\gamma$  tendent vers l'infini la masse volumique est indépendante de la pression. Elle ne dépend pas non plus de la température, on peut donc écrire  $\rho = 1 + At f(c)$ . Étant donné que les masses volumiques des fluides lourd et léger sont respectivement égales à  $1 \pm At$ , on a nécessairement  $\rho = 1 + At (2 c^{(0)} - 1)$ . À l'ordre -1 en nombre d'Atwood, on obtient l'équilibre hydrostatique

$$\partial_i p^{(1,0)} + \rho^{(0,0)} \,\delta_{i3} = 0. \tag{2.49}$$

L'ordre 0 en nombre d'Atwood fournit les équations de l'approximation de Boussinesq

$$\partial_{t} u_{i}^{(0,0)} + u_{j}^{(0,0)} \partial_{j} u_{i}^{(0,0)} = -\partial_{i} p^{(1,1)} + \frac{1}{Re} \partial_{j} \sigma_{ij}^{(0,0)} - (2 c^{(0)} - 1) \delta_{i3},$$
  
avec  $\partial_{i} u_{i}^{(0,0)} = 0,$   
 $\partial_{t} c^{(0)} + u_{j}^{(0)} \partial_{j} c^{(0)} = \frac{1}{Sc \, Re} \partial_{i} [\mathcal{D}^{\star} \partial_{i} c^{(0)}].$ 

$$(2.50)$$

Dans cette configuration particulière, dans la limite des  $\gamma$  infinis, d'une stratification et d'un nombre d'Atwood négligeable, la thermodynamique est découplée de la dynamique de l'écoulement.

#### Remarque

L'adimensionnement utilisé dans le code de simulation est légèrement différent de celui-ci. Les équations sont réécrites avec  $U = \sqrt{gL}$ , comme pour les équations anélastiques. Le seul changement induit concerne le terme de flottabilité de l'équation de quantité de mouvement, qui se réécrit

$$\partial_t u_i^{(0,0)} + u_j^{(0,0)} \,\partial_j u_i^{(0,0)} = -\partial_i p^{(1,1)} + \frac{1}{Re} \,\partial_j \sigma_{ij}^{(0,0)} - At \left(2 \,c^{(0)} - 1\right) \delta_{i3}. \tag{2.51}$$

## 2.4 Le modèle de Sandoval

Dans cette section, le modèle de Sandoval, un modèle physique heuristique fréquemment utilisé est établi de deux façons. D'abord par la méthode historique (Sandoval, 1995), dont on présente les manques. Dans un deuxième temps, on trouve que ce modèle est une limite du modèle quasi-isobare sous certaines hypothèses bien formulées. Ce modèle est abondamment utilisé dans la littérature (voir table 1.1), en raison de sa simplicité et de sa capacité à capturer les effets d'asymétrie de la couche de mélange à nombre d'Atwood non petit devant 1. Il ne compte qu'un terme de plus que le modèle de Boussinesq, présent dans l'équation de continuité.

## 2.4.1 Établissement historique du modèle

Le point de départ est le système Navier-Stokes compressible dimensionné :

$$\partial_t \rho + \partial_j (\rho u_j) = 0$$
  

$$\partial_t (\rho u_i) + \partial_j (\rho u_i u_j) = -\partial_i p + \partial_j \tau_{ij} + \rho g_i$$
  
avec  $\tau_{ij} = \mu \left( \partial_j u_i + \partial_i u_j - \frac{2}{3} \delta_{ij} \partial_n u_n \right),$   

$$\rho \partial_t C_\alpha + \rho u_j \partial_j C_\alpha = \partial_n \left( \rho \mathcal{D} \partial_n C_\alpha \right),$$
(2.52)

où  $\tau_{ij}$  est le tenseur des contraintes visqueuses,  $\mu$  est la viscosité dynamique,  $C_{\alpha} = 1, 2$  est la concentration massique de l'espèce  $\alpha$ , et  $\mathcal{D}$  est le coefficient de diffusion d'espèce. On a  $C_1 + C_2 = 1$ , et la masse totale contenue dans un volume est la somme des masses des deux fluides :

$$\frac{1}{\rho} = \frac{C_1}{\rho_1} + \frac{C_2}{\rho_2} \quad \text{d'où} \quad \frac{1}{\rho} = \left(\frac{1}{\rho_2} - \frac{1}{\rho_1}\right)C_2 + \frac{1}{\rho_1}.$$
(2.53)

À ce stade, une hypothèse est faite. Dans sa thèse, Sandoval suppose que le nombre de Mach est bas, et que les fluctuations de température sont négligeables, pour conclure que la masse volumique ne dépend que de la fraction massique  $C_2$ . Livescu (2013) exprime cette hypothèse sous la forme  $p, T \to \infty$  et  $p/T \to C^{ste}$ . Cette hypothèse est le point clé de l'établissement de ce modèle. On peut donc écrire  $\left(\frac{1}{\rho_2} - \frac{1}{\rho_1}\right) \partial_n C_2 = -\frac{1}{\rho^2} \partial_n \rho$ . L'équation suivante :

$$\partial_t \rho + u_j \partial_j \rho = \rho \,\partial_n \left(\frac{\mathcal{D}}{\rho} \partial_n \rho\right) \tag{2.54}$$

peut remplacer l'équation de transport de la concentration du système (2.52). L'équation de continuité devient :

$$\partial_n u_n = -\partial_n \left(\frac{\mathcal{D}}{\rho}\partial_n \rho\right). \tag{2.55}$$

Cette équation dimensionnée rend compte du mélange de deux fluides incompressibles de masses volumiques différentes.

Les hypothèses utilisées pour écarter la température et la compressibilité des fluides portent sur des variables thermodynamiques qui tendent vers l'infini. Dans le cadre de cette thèse, on préfère considérer des limites de nombres adimensionnés liés aux caractéristiques intrinsèques des fluides.

#### 2.4.2 Établissement rigoureux du modèle

Le modèle de Sandoval peut s'exprimer comme un intermédiaire entre le modèle quasiisobare et le modèle de Boussinesq. Dans les trois cas, on est en présence de fluides non stratifiés. Comparé au modèle de Boussinesq, le modèle de Sandoval rend compte de la perte du caractère solénoïdal du champ de vitesse lorsque les deux fluides sont de masses volumiques très différentes. Par rapport au modèle Sandoval, le modèle quasi-isobare ajoute une véritable équation d'état faisant intervenir pression et température, cette dernière intervenant également dans une équation d'évolution de l'énergie interne.

Rappelons que les hypothèses prises pour établir le modèle quasi-isobare sont  $\gamma_r \text{Ma}^2 \ll 1$  et  $Sr \ll 1$ . Pour obtenir le modèle de Sandoval, on ajoute deux hypothèses : le nombre de Prandtl est supposé petit devant 1 et les coefficients adiabatiques (de chaque fluide pur et donc du mélange) sont considérés infinis. Cette deuxième hypothèse permet de rompre la dépendance de la masse volumique avec la pression. Notons également que nous travaillons ici avec des équations adimensionnées.

On part donc du système d'équations quasi-isobares. Commençons par évoquer l'équation d'énergie interne (2.43b) qu'on multiplie par Pr et qu'on divise par  $\gamma_r$ . On appliquera la limite sur  $\gamma_r$  un peu plus loin, mais cette division permet de ne pas observer de termes qui tendent vers 0 par le nombre de Prandtl et vers l'infini par le coefficient adiabatique. La limite  $Pr \to 0$  ne laisse que le terme de diffusion de température, on en conclut que  $T^{(0)} = T^{(0)}(t)$ ne dépend pas de l'espace. Avec la condition à la limite  $T^{(0)} = 1$  en bas de la boîte, on en déduit l'indépendance par rapport au temps de la température.

Intéressons-nous maintenant à l'équation de divergence de la vitesse (2.41). Le premier terme du membre de droite tend vers 0 quand  $\gamma_m$  et  $\gamma_r$  tendent vers l'infini. La dérivée de  $\gamma_m(c)$  par rapport à c est facilement obtenue à partir de l'équation (2.11), et on peut conclure que le deuxième terme du membre de droite de (2.41) tend également vers 0. Le troisième terme est nul puisque le champ de température est uniforme. Il reste donc le dernier terme, soit :

$$\partial_i u_i^{(0)} = \frac{-2At}{Sc \ Re} \frac{T^{(0)}}{p^{(0)}} \partial_i [(\rho^{(0)} \ \mathcal{D}^\star) \ \partial_i c^{(0)}], \tag{2.56}$$

où on a pris la limite de  $\Delta_{H,L}^{\star}$  exprimée sous l'équation (2.12). On rappelle que  $p^{(0)} = p^{(0)}(t)$  en quasi-isobare. On écrit l'équation d'état quasi-isobare sous la forme suivante :

$$\rho^{(0)} = \frac{p^{(0)}}{T^{(0)}} \frac{1}{1 + At - 2At c^{(0)}}.$$
(2.57)

La limite  $\gamma_r \to \infty$  implique une absence complète de compressibilité des fluides, c'est-à-dire que  $\tau_s = \rho^{-1} (\partial \rho / \partial p)_s = 0$ , et la masse volumique ne dépend pas de la pression. On en conclut que

$$\rho^{(0)} = \frac{K}{1 + At - 2At c^{(0)}},\tag{2.58}$$

où K est une constante du temps et de l'espace telle que  $K = \frac{p^{(0)}}{T^{(0)}}$ . Il reste à la calculer. On utilise pour cela le calcul de la masse totale de fluide présent, exprimé sous forme d'intégrale en équation (2.42) et qui s'écrit ici

$$M = \int_{V} \rho^{(0)} dV = K \int_{V} \frac{dV}{1 + At - 2At c^{(0)}}.$$
 (2.59)

On peut par exemple calculer la masse à l'instant initial avec un profil de masse volumique  $\rho^{(0)}$  tel que  $\rho^{(0)} = \rho_2 = (1+At)\rho_r$  dans la moitié supérieure du domaine  $\rho^{(0)} = \rho_1 = (1-At)\rho_r$  dans la moitié inférieure. On suppose que les deux moitiés du domaine sont de même hauteur H, et la section horizontale est notée  $S_{xy}$ . On écrit :

$$M = \int_{-H}^{H} S_{xy} \rho^{(0)} dz = 2S_{xy} H At.$$
 (2.60)

Et:

$$M = K \int_{-H}^{H} \frac{S_{xy} dz}{1 + At - 2At c^{(0)}} = K S_{xy} H \frac{2At}{1 - At^2}.$$
 (2.61)

Par comparaison il vient  $K = 1 - At^2$ . L'équation d'état sans dimension du modèle Sandoval s'écrit donc

$$\rho^{(0)} = \frac{1 - At^2}{1 + At - 2At c^{(0)}}.$$
(2.62)

Notons bien que la concentration définie en début de ce chapitre est la concentration en fluide lourd et correspond à  $C_2$  utilisée par Sandoval dans ses calculs (voir section 2.4.1). En partant de l'équation dimensionnée (2.53), on peut retrouver l'équation d'état obtenue en (2.62). En écrivant  $\rho_2 = (1 + At)\rho_r$  et  $\rho_1 = (1 - At)\rho_r$ , on obtient l'équation dimensionnée suivante :

$$\rho = \rho_r \frac{1 - At^2}{1 + At - 2At c^{(0)}}.$$
(2.63)

Revenons à présent à l'équation de divergence de vitesse (2.56), qu'on a calculée en prenant les limites  $Pr \to 0$  et  $\gamma_r \to \infty$ . Fort de l'équation d'état (2.62), on écrit :

$$-2 At \partial_i c^{(0)} = -(1 - At^2) \frac{1}{[\rho^{(0)}]^2} \partial_i \rho^{(0)}.$$
 (2.64)

En injectant ce résultat dans l'équation (2.56), on obtient :

$$\partial_i u_i^{(0)} = \frac{-1}{Sc \, Re} \,\partial_i \left( \frac{\mathcal{D}^\star}{\rho^{(0)}} \,\partial_i \rho^{(0)} \right), \tag{2.65}$$

où on a réutilisé  $\frac{p^{(0)}}{T^{(0)}} = K = 1 - At^2$ . L'équation (2.65) est la version adimensionnée de l'équation (2.55) obtenue par Sandoval.

Le système complet Sandoval est constitué de l'équation de quantité de mouvement (2.43a) qui garde la même forme que dans le modèle quasi-isobare, de la contrainte (2.65) et de l'équation d'état reliant masse volumique et concentration (2.62).

## 2.4.3 Limite Boussinesq des équations de Sandoval

Il est possible d'obtenir les équations de Boussinesq comme limite du modèle de Sandoval. L'hypothèse à ajouter est le caractère négligeable du nombre d'Atwood,  $At \ll 1$ . L'équation d'état (2.62) se réduit par un développement limité à

$$\rho^{(0)} = 1 + At \left(2c^{(0)} - 1\right). \tag{2.66}$$

On écrit une décomposition en nombre d'Atwood pour la masse volumique  $\rho^{(0)}$ :

$$\rho^{(0)} = \rho^{(0,0)} + At \,\rho^{(0,1)} + \dots \tag{2.67}$$

Par identification, on trouve  $\rho^{(0,0)} = 1$  et  $\rho^{(0,1)} = 2c^{(0)} - 1$ . La décomposition est insérée dans la contrainte (2.65) et à l'ordre 0, il ne reste que :

$$\partial_i u_i^{(0)} = \frac{-1}{Sc \, Re} \,\partial_i \left( \frac{\mathcal{D}^\star}{\rho^{(0,0)}} \,\partial_i \rho^{(0,0)} \right) \quad \text{d'où} \quad \partial_i u_i^{(0)} = 0, \tag{2.68}$$

 $\operatorname{car} \partial_i \rho^{(0,0)} = \partial_i 1 = 0.$ 

## 2.5 L'approximation de Boussinesq

## 2.5.1 Établissement des équations de Navier-Stokes

Dans cette section, l'approximation de Boussinesq est établie une deuxième fois, mais cette fois depuis les équations de Navier-Stokes complètes. Pour cela, une triple limite est prise. La stratification tend vers zéro, le nombre d'Atwood aussi et les indices adiabatiques  $\gamma$  tendent vers l'infini.

Avant effectuer le développement asymptotique, les équations de Navier-Stokes (2.6) sont réécrites en utilisant la vitesse caractéristique  $U = \sqrt{At g L}$ . L'équation de quantité de mouvement s'écrit alors

$$\rho\left(\partial_t u_i + u_j \partial_j u_i\right) = -\frac{1}{At \, Sr} \partial_i p + \frac{1}{Re} \, \partial_j \sigma_{ij} - \frac{1}{At} \, \rho \, \delta_{i3}, \qquad (2.69)$$

où les nombres adimensionnés définis en (2.5) s'écrivent

$$Re = At^{1/2} \frac{g^{1/2} L^{3/2}}{\mu/\rho_r}, \quad \gamma_r \operatorname{Ma}^2 = At \frac{g L}{R T_r} = At \, Sr, \quad \operatorname{Fr} = At.$$
(2.70)

Cherchons maintenant la limite des équations (2.69) quand la stratification Sr et le nombre d'Atwood At tendent simultanément vers 0 (Zeytounian, 1990) :

$$\frac{Sr}{At} = \hat{B} = O(1). \tag{2.71}$$

Les variables sont décomposées sous la forme

$$u = u^{(0)} + At u^{(1)} + \dots$$

$$\rho = \rho^{(0)} + At \rho^{(1)} + \dots$$

$$c = c^{(0)} + At c^{(1)} + \dots$$

$$p = p^{(0)} + At p^{(1)} + At^2 p^{(2)} + \dots$$
(2.72)

Comme à la section 2.3.1, on remarque que la compressibilité tend vers 0, ce qui se traduit par  $\tau_s = \rho^{-1} (\partial \rho / \partial p)_s = 0$ , de telle sorte que la masse volumique ne dépend plus de la pression. En outre, le terme de dissipation de l'équation d'énergie (2.6c) ne contribue pas à l'ordre 0 car il est d'ordre plus élevé. Le terme proportionnel à  $\Delta_{H,L}^*$  tend vers 0 avec le nombre d'Atwood, le terme dominant de l'équation est donc le terme de diffusion. Le raisonnement est identique à celui conduit à la section 2.3.1 et le champ de température est uniforme et stationnaire. On a ainsi :  $\rho = 1 + At (2 c^{(0)} - 1)$ . La masse volumique  $\rho^{(0)} = 1$  est uniforme sur tout le domaine et stationnaire. La densité à l'ordre 1  $\rho^{(1)}$  dépend du temps et des trois variables d'espace. À l'instant initial,  $\rho^{(1)} = 2 c^{(0)} - 1$  est constant par morceaux. À l'ordre 0 en nombre d'Atwood, le champ de vitesse est solénoïdal  $\partial_i u_i^{(0)} = 0$  et la température est uniforme. À l'ordre  $At^{-2}$ , l'équation de quantité de mouvement (2.69) se réduit à

$$\frac{1}{At^2 \hat{B}} \partial_i p^{(0)} = 0, \qquad (2.73)$$

ce qui implique que  $p^{(0)} = p^{(0)}(t)$ . À l'ordre suivant  $At^{-1}$ ,

$$\frac{1}{At\,\hat{B}}\,\partial_i p^{(1)} + \frac{\rho^{(0)}}{At}\,\delta_{i3} = 0,\tag{2.74}$$

l'équilibre hydrostatique est obtenu. L'équation de quantité de mouvement (2.69) à l'ordre 0 s'écrit

$$\partial_t u_i^{(0)} + u_j^{(0)} \,\partial_j u_i^{(0)} = -\widehat{B}^{-1} \partial_i p^{(2)} + Re^{-1} \,\partial_{jj} u_i^{(0)} - \rho^{(1)} \,\delta_{i3}, \tag{2.75}$$

où la constante  $\widehat{B}$  peut être absorbée dans le multiplicateur de Lagrange  $p^{(2)}$ . De plus, toujours à l'ordre 0, l'équation de concentration est

$$\partial_t c^{(0)} + u_j^{(0)} \,\partial_j c^{(0)} = (Sc \, Re)^{-1} \,\partial_i [\mathcal{D}^* \,\partial_i c^{(0)}].$$
(2.76)

avec l'hypothèse  $\mathcal{D}^{\star} = 1$ . En utilisant l'équation des fluctuations de masse volumique donnée plus haut, on obtient de nouveau le système d'équations de Boussinesq (2.50) pour la vitesse  $u_i^{(0)}$ , la pression  $p^{(2)}$  et la concentration  $c^{(0)}$ , dans le cadre d'un écoulement Rayleigh-Taylor.

$$\partial_t u_i^{(0)} + u_j^{(0)} \partial_j u_i^{(0)} = -\partial_i p^{(2)} + Re^{-1} \partial_{jj} u_i^{(0)} - (2 c^{(0)} - 1) \delta_{i3},$$
  
a contrainte  $\partial_i u_i^{(0)} = 0,$  (2.77)

$$\partial_t c^{(0)} + u_j^{(0)} \partial_j c^{(0)} = (Sc \, Re)^{-1} \partial_{ii} c^{(0)}.$$

#### Remarques

avec 1

- 1. Ce modèle décrit les configurations de deux couches de fluides non stratifiées, et pour des nombres d'Atwood qui tendent vers zéro.
- 2. Ce système d'équations est de type elliptique. Aucune condition aux limites n'est requise pour la pression. Il est nécessaire d'ajouter des conditions initiales.
- 3. La pression qui apparaît dans l'équation de quantité de mouvement est du deuxième ordre en nombre d'Atwood. Comme pour d'autres approximations de Boussinesq, la pression  $p^{(2)}$  est définie à une constante additive près. Quant à la pression  $p^{(1)}$ , il s'agit du gradient de pression hydrostatique calculé à t = 0, et fonction de z uniquement. La pression  $p^{(2)}$  constitue l'écart à ce gradient moyen.
- 4. La divergence du champ de vitesse est nulle, bien que le modèle décrive un mélange entre deux fluides de masses volumiques différentes. Ce modèle n'étant valide qu'à des nombres d'Atwood tendant vers zéro, il n'y a pas de contradiction.
- 5. De façon similaire au modèle quasi-isobare, l'énergie totale, définie par

$$E^{(0)} = \frac{1}{2} u_i^{(0)} u_i^{(0)} + (2 c^{(0)} - 1) x_i \delta_{i3},$$

ne satisfait pas d'équation de conservation en raison du terme visqueux.

- 6. Le modèle de Boussinesq ne dépend que de 5 paramètres : le nombre d'Atwood At, le nombre de Reynolds Re, le nombre de Schmidt Sc, et les deux rapports de dimensions du domaine.
- 7. Comme évoqué précédemment, les équations utilisées dans le code de simulation sont basées sur un adimensionnement différent pour la vitesse caractéristique. Réécrite avec  $U = \sqrt{g L}$ , le système d'équations du mouvement en approximation de Boussinesq est

$$\partial_t u_i^{(0)} + u_j^{(0)} \,\partial_j u_i^{(0)} = -\partial_i p^{(2)} + Re^{-1} \,\partial_{jj} u_i^{(0)} - At \left(2 \,c^{(0)} - 1\right) \delta_{i3},$$

avec la contrainte  $\partial_i u_i^{(0)} = 0,$ 

$$\partial_t c^{(0)} + u_j^{(0)} \partial_j c^{(0)} = (Sc \, Re)^{-1} \partial_{ii} c^{(0)}.$$

(2.78)

## 2.6 Discussion sur les modèles physiques

## 2.6.1 Récapitulatif

Dans cette partie, un récapitulatif de la physique modélisée par chaque modèle est fait. La figure 2.1 présente les liens entre les cinq modèles évoqués précédemment. Le modèle compressible est placé tout à gauche, c'est le plus complet des modèles. Le développement asymptotique demande un premier choix, concernant le paramètre de stratification Sr et le nombre de Froude Fr (voir section 2.1.3). Une stratification d'ordre 1 conduit au modèle



FIGURE 2.1 – Modèles physiques : hypothèses d'établissement. Chaque ligne correspond à un développement effectué dans ce manuscrit.

anélastique (section 2.2), tandis qu'une stratification négligeable devant 1 conduit au modèle quasi-isobare (section 2.3). À partir de ce modèle, on peut obtenir le modèle de Sandoval (section 2.4.2) en ajoutant deux hypothèses conduisant à l'incompressibilité des fluides et au caractère isotherme de l'écoulement.

Le modèle de Boussinesq est le plus restreint en termes de physique et a été établi dans ce chapitre de trois façons différentes : depuis le modèle quasi-isobare (section 2.3.1), depuis le modèle Sandoval (section 2.4) et depuis les équations compressibles complètes (section 2.5). Dans le premier cas, on rajoute deux hypothèses au modèle quasi-isobare qui éliminent toute compressibilité : le nombre d'Atwood est supposé petit devant 1 et les indices adiabatiques tendent vers l'infini. Dans le deuxième cas, ajouter l'hypothèse de petit Atwood est suffisant. Dans le dernier cas, on prend simultanément les limites de petit Sr et petit At. La ligne « compressible vers quasi-isobare vers Sandoval vers Boussinesq » représente un effeuillage progressif des phénomènes de compressibilité. Une étude comparative effectuée avec l'ensemble de ces modèles pourrait permettre d'isoler et de mesurer l'importance des différents effets physiques sur la croissance de l'instabilité. De tels effets physiques sont par exemple l'acoustique et la stratification, les effets thermiques et l'effet de dissymétrie de la couche de mélange.

Comme évoqué en introduction, on peut distinguer deux types de compressibilité : la compressibilité statique et la compressibilité dynamique. La première est liée à la stratification des fluides à l'état initial, sous l'effet de la gravité. La deuxième est liée à l'acoustique, à l'équation d'état (liens entre pression et masse volumique) et à l'équation d'énergie. Les quatre modèles supportent l'un, l'autre, aucun ou les deux types de compressibilité. Un autre moyen de discriminer les modèles est d'évoquer la décomposition en modes de Kovásnay. Tout écoulement peut être séparé en trois contributions : les modes d'entropie, d'acoustique et de vorticité. Le premier est lié à l'équation d'énergie et rend compte des variations d'entropie et d'énergie interne des écoulements. Le second est lié à la propagation d'ondes dans l'écoulement (et aux mouvements infinitésimaux qui correspondent), tandis que le troisième concerne l'écoulement incompressible. Le tableau 2.1 rend compte des modes supportés par chaque modèle. Les

Modèles	Compressibilité	Compressibilité	Modes	de	Kovásnay	
	statique	dynamique	Vorticité	Entropie	Acoustique	
Compressible	Oui	Oui	Oui	Oui	Oui	
Anélastique	Oui	Partiel	Oui	Oui	Non	
Quasi-isobare	Non	Partiel	Oui	Partiel	Non	
Sandoval	Non	(très) partiel	Oui	Non	Non	
Boussinesq	Non	Non	Oui	Non	Non	

TABLE 2.1 – Compressibilités et modes de Kovásnay supportés par chacun des modèles.

équations de Navier-Stokes compressibles rendent compte des deux types de compressibilité, et supportent les trois modes de Kovásnay. Le modèle anélastique perd le mode acoustique, et ne supporte donc que partiellement la compressibilité dynamique. Comparé au modèle compressible, on peut espérer des pas de temps plus grands dans les simulations numériques effectuées avec ce modèle. Le modèle quasi-isobare ne supporte pas la compressibilité statique, et son mode d'entropie est légèrement dégradé (le terme de dissipation est absent de l'équation d'énergie). Les modèles de Sandoval et de Boussinesq partagent le même support des modes de Kovásnay, à savoir l'unique mode de vorticité. En termes de compressibilité, les deux modèles sont incompressibles, cependant le modèle de Sandoval capture l'effet de dissymétrie bulle-aiguille grâce au terme supplémentaire présent dans l'équation de continuité. Ce phénomène est fréquemment associé à un effet de compressibilité dynamique.

## 2.6.2 Domaines de validité

La figure 2.2 présente les domaines de validité des quatre modèles, dans l'espace du paramètre de stratification et du nombre d'Atwood. Le cas At = 1 est écarté quel que soit le modèle (on ne parle pas de fluide de masse volumique nulle). En théorie, le modèle compressible est valide dans tout l'espace At, Sr. Néanmoins, utiliser un modèle à la frontière de sa validité, ou lorsqu'un de ses paramètres prend une limite infinie ou nulle, peut être inadapté (Zeytounian, 1990). Pour un paramètre de stratification faible, les fluides sont peu compressibles, la vitesse des ondes acoustiques est très élevée. Une simulation numérique compressible à Sr < 1 serait extrêmement coûteuse en raison du très faible pas de temps. Pour ces raisons, on limite le domaine d'utilisation du modèle compressible aux Sr modérés et grands. À l'opposé, le modèle Boussinesq n'est valide que pour Sr = 0 et  $At \ll 1$ . Ce modèle présente le domaine de validité le plus restreint, qui correspond à des fluides se comportant comme des liquides isothermes de masses volumiques très proches. Le modèle quasi-isobare étend ce domaine de validité à toute



FIGURE 2.2 – Modèles physiques : domaines de validité ou d'utilisation.

valeur du nombre d'Atwood. Il résout en effet les phénomènes de compressibilité et d'entropie qui surviennent lorsque les masses volumiques des deux fluides sont sensiblement différentes. On peut décrire cette situation comme étant celle de deux fluides (liquides ou gaz) de masses volumiques potentiellement très différentes et qui s'échauffent lors des mouvements. Quant au modèle de Sandoval, sa position est intermédiaire, il n'a apparemment pas de limite en nombre d'Atwood et met en jeu des fluides incompressibles se comportant comme des liquides, de masses volumiques potentiellement très différentes, et isothermes.

Le domaine de validité et d'utilisation le plus complexe à déterminer est celui du modèle anélastique. Pour le paramètre de stratification, on doit avoir  $Sr = \mathcal{O}(1)$  (voir section 2.1.3). On observe deux limitations sur les valeurs du nombre d'Atwood. La première concerne les petites valeurs. Dans ce régime, la croissance de la couche de mélange est courte, une saturation s'opère. Elle est liée à la stratification des masses volumiques initiales : dans la partie inférieure de la boîte, le fluide léger devient plus dense que le fluide lourd, qui ne peut donc pas pénétrer plus avant dans le fluide léger. De même, en haut de la boîte, le fluide lourd est trop peu dense pour que le fluide léger puisse continuer à s'élever. Or, on a constaté que le modèle anélastique n'était pas capable de capturer cet effet. La croissance de l'instabilité ralentit pendant un temps, puis repart à partir d'un germe de manière non physique. Il est probable que ceci soit lié à la décomposition de la concentration. Rappelons qu'en anélastique, chaque grandeur est décomposée en un terme d'ordre (0) en  $\gamma_r Ma^2$  qui ne dépend que de la variable z, et d'un terme d'ordre (1), qui dépend des trois variables d'espace et du temps (équation 2.24). Cette décomposition suppose que le terme d'ordre (1) reste petit devant le terme d'ordre (0). Dans les simulations, cela est bien vérifié pour l'ensemble des variables, excepté pour la concentration. La concentration d'ordre (0) est constante en z et sa valeur est autour de 0.5 (voir section 2.1.2.3). Dans le fluide lourd, la concentration totale est de 1, donc la valeur de la concentration d'ordre (1) est autour de 0.5, c'est-à-dire du même ordre que la concentration d'ordre (0). La deuxième limitation en nombre d'Atwood est une borne supérieure. Il a été observé par Olson & Cook (2007) que des phénomènes acoustiques importants peuvent se former dans le fluide lourd (partie supérieure de la boîte), pouvant aller jusqu'à la formation d'une onde de choc. Le mode acoustique de l'écoulement ne serait alors plus négligeable dans le développement de l'instabilité. Si l'onde de choc ne traverse pas la couche de mélange, elle emporte en revanche de l'énergie. Le modèle anélastique ne rend pas compte de ce phénomène et pourrait présenter une surévaluation de l'énergie interne dans la couche de mélange. On restreint le domaine d'utilisation de l'approximation anélastique à At < 0.5, domaine où les phénomènes acoustiques restent faibles.

## 2.7 Équations de transport de la vorticité

L'objectif dans cette section est de dériver les équations de transport de la vorticité pour les modèles compressible, anélastique et de Boussinesq.

## 2.7.1 En régime compressible

Le point de départ pour ce calcul est l'équation de quantité de mouvement dimensionnée, en formulation compressible :

$$\rho(\partial_t u_k + u_m \,\partial_m u_k) = -\partial_k p + \partial_m \sigma_{km} - \rho \,g \,\delta_{k3}. \tag{2.79}$$

On applique l'opérateur rotationnel à cette équation, sous la forme de l'application de  $\varepsilon_{ijk}\partial_j$ :

$$\partial_t \omega_i + u_m \,\partial_m \omega_i = -\varepsilon_{ijk} \,\partial_j u_m \,\partial_m u_k + \varepsilon_{ijk} \,\frac{1}{\rho^2} \partial_j \rho \,\partial_k p + \varepsilon_{ijk} \,\partial_j (\frac{1}{\rho} \partial_m \sigma_{km}). \tag{2.80}$$

Simplifions le terme  $-\varepsilon_{ijk} \partial_j u_m \partial_m u_k$ . On rappelle les définitions du tenseur de déformation  $D_{ij} = \frac{1}{2}(\partial_j u_i + \partial_i u_j)$  et du tenseur de rotation  $\Omega_{ij} = \frac{1}{2}(\partial_i u_j - \partial_j u_i)$ . Commençons par observer que :

$$\varepsilon_{mli} \omega_i = \varepsilon_{mli} \varepsilon_{ijk} \partial_j u_k,$$

$$= \varepsilon_{mli} \varepsilon_{ijk} (D_{jk} + \Omega_{jk}),$$

$$= \varepsilon_{mli} \varepsilon_{ijk} \Omega_{jk},$$

$$= \varepsilon_{iml} \varepsilon_{ijk} \Omega_{jk},$$

$$= (\delta_{mj} \delta_{lk} - \delta_{mk} \delta_{lj}) \Omega_{jk},$$

$$= \Omega_{ml} - \Omega_{lm},$$

$$= 2 \Omega_{ml},$$
(2.81)

où on a utilisé la formule générale :

$$\varepsilon_{ijk}\,\varepsilon_{lmk} = \delta_{il}\delta_{jm} - \delta_{im}\delta_{jl}.\tag{2.82}$$

On peut donc calculer :

$$\varepsilon_{ijk} \partial_j u_m \partial_m u_k = \varepsilon_{ijk} (D_{mj} + \Omega_{mj}) (D_{km} + \Omega_{km}),$$

$$= \varepsilon_{ijk} (D_{mj} + \frac{1}{2} \varepsilon_{mjl} \omega_l) (D_{km} + \frac{1}{2} \varepsilon_{kmq} \omega_q),$$

$$= \varepsilon_{ijk} D_{mj} D_{km} + \frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{kmq} D_{mj} \omega_q$$

$$+ \frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{mjl} D_{km} \omega_l + \frac{1}{4} \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{mjl} \varepsilon_{kmq} \omega_l \omega_q.$$
(2.83)

Étudions ces quatre termes. Le premier est nul car il est le produit d'un tenseur antisymétrique par un tenseur symétrique en (j, k). Le second peut s'écrire :

$$\frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{kmq} D_{mj} \omega_q = -\frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{qmk} D_{mj} \omega_q,$$

$$= \frac{1}{2} (D_{jj} \omega_i - D_{iq} \omega_q),$$
(2.84)

où on a utilisé la formule (2.82). De même, le troisième terme se réécrit :

$$\frac{1}{2}\varepsilon_{ijk}\,\varepsilon_{mjl}\,D_{km}\,\omega_l = \frac{1}{2}(D_{jj}\,\omega_i - D_{li}\,\omega_l).$$
(2.85)

Quant au quatrième terme, on obtient une somme de 3 termes semblables en le décomposant suivant *i*. En se rappelant que  $\varepsilon_{ijk}$  est nul si 2 indices ou plus sont égaux, on a (par exemple pour i = 1):

$$\frac{1}{4}\varepsilon_{1jk}\varepsilon_{mjl}\varepsilon_{kmq}\omega_{l}\omega_{q} = \frac{1}{4}\varepsilon_{m2l}\varepsilon_{3mq}\omega_{l}\omega_{q} - \frac{1}{4}\varepsilon_{m3l}\varepsilon_{2mq}\omega_{l}\omega_{q},$$

$$= -\frac{1}{4}\varepsilon_{2ml}\varepsilon_{3mq}\omega_{l}\omega_{q} + \frac{1}{4}\varepsilon_{3ml}\varepsilon_{2mq}\omega_{l}\omega_{q},$$

$$= -\frac{1}{4}\varepsilon_{2mq}\varepsilon_{3ml}\omega_{q}\omega_{l} + \frac{1}{4}\varepsilon_{3ml}\varepsilon_{2mq}\omega_{l}\omega_{q},$$

$$= 0.$$
(2.86)

Au final, la somme de ces quatre termes est telle que :

$$-\varepsilon_{ijk}\,\partial_j u_m\,\partial_m u_k = D_{ij}\omega_j - D_{jj}\,\omega_i. \tag{2.87}$$

Fort de l'équation précédente (2.87), l'équation (2.80) s'écrit :

$$\partial_t \omega_i + u_m \,\partial_m \omega_i = D_{ij} \omega_j - D_{jj} \,\omega_i + \varepsilon_{ijk} \,\frac{1}{\rho^2} \partial_j \rho \,\partial_k p + \varepsilon_{ijk} \,\partial_j (\frac{1}{\rho} \partial_m \sigma_{km}). \tag{2.88}$$

Il s'agit de l'équation compressible dimensionnée de transport de la vorticité, qui servira dans une des deux méthodes de calcul des équations de vorticité pour les modèle anélastique et de Boussinesq.

## 2.7.2 En approximation anélastique

On souhaite établir l'équation de transport de la vorticité en approximation anélastique, dans le cadre de l'instabilité de Rayleigh-Taylor. On peut le faire de deux façons différentes (voir figure 2.3). Dans cette note seront développés les deux calculs. On observe que les équations obtenues sont identiques.



FIGURE 2.3 – Deux façons de calculer l'équation de transport de vorticité en approximation anélastique.

## 2.7.2.1 Prise du rotationnel de l'équation anélastique de conservation de la quantité de mouvement

Notre point de départ est le système Navier-Stokes en approximation anélastique. L'équation de conservation de la quantité de mouvement adimensionnée s'écrit :

$$\partial_t u_k + u_m \,\partial_m u_k = -\frac{1}{S_r} \frac{1}{\rho^{(0)}} \partial_k p^{(1)} + \frac{1}{Re} \frac{1}{\rho^{(0)}} \partial_\ell \sigma_{k\ell} - \frac{\rho^{(1)}}{\rho^{(0)}} \,\delta_{k3},\tag{2.89}$$

où on a  $\sigma_{k\ell} = \partial_k u_\ell + \partial_\ell u_k - \frac{2}{3} \delta_{k\ell} \partial_m u_m$ . La masse volumique s'écrit  $\rho(x, y, z, t) = \rho^{(0)}(z) + \rho^{(1)}(x, y, z, t)$ , conformément à la renormalisation définie en équation (2.31). On rappelle la définition de l'adimensionnement ayant conduit à l'équation de quantité de mouvement anélastique (2.89) :

$$\begin{cases}
 u = \sqrt{g L} u^{\star}, \\
 \rho = \rho_r \rho^{\star}, \\
 p = \mathcal{R}/\mathcal{M}_r \rho_r T_r p^{\star}, \\
 t = \sqrt{\frac{L}{g}} t^{\star},
 \end{cases}$$
(2.90)

où les grandeurs  $\star$  sont les grandeurs adimensionnées, notation omise dans l'équation (2.89) et dans la suite. Dans ce système d'adimensionnement on a  $S_r = \frac{gL}{RT_r}$  et  $Re = L\sqrt{gL} (\rho_r/\mu)$ . On prend le rotationnel de l'équation (2.89) pour aboutir à l'équation de transport de la vorticité. Cela est effectué en appliquant l'opérateur  $\varepsilon_{ijk}\partial_j$ :

$$\partial_{t}\omega_{i} + u_{m} \partial_{m}\omega_{i} + \varepsilon_{ijk} \partial_{j}u_{m} \partial_{m}u_{k} = \frac{\varepsilon_{ijk}}{S_{r}} \left( \partial_{j}(\frac{1}{\rho^{(0)}}) \partial_{k}p^{(1)} + \frac{1}{\rho^{(0)}} \partial_{j}\partial_{k}p \right) + \frac{\varepsilon_{ijk}}{Re} \partial_{j} \left( \frac{1}{\rho^{(0)}} \partial_{\ell}\sigma_{k\ell} \right) - \varepsilon_{ijk} \delta_{k3} \partial_{j}\rho^{(1)},$$
(2.91)

où on a utilisé  $\omega_i = \varepsilon_{ijk} \partial_j u_k$ . Le terme  $\varepsilon_{ijk} \partial_j \partial_k p$  s'annule : il s'agit du produit entre un tenseur antisymétrique en (j, k) et d'un tenseur symétrique en ces mêmes indices. Quant au troisième terme du membre de gauche, il se réécrit suivant l'équation (2.87) :

$$\varepsilon_{ijk} \,\partial_j u_m \,\partial_m u_k = -D_{ij} \,\omega_j + D_{jj} \,\omega_i, \tag{2.92}$$

où D est le tenseur de déformation pure  $D_{ij} = \frac{1}{2}(\partial_j u_i + \partial_i u_j)$ . Le dernier terme du membre de droite s'exprime sous la forme

$$-\varepsilon_{ijk}\,\delta_{k3}\,\partial_j\rho^{(1)} = -\varepsilon_{ij3}\,\partial_j\rho^{(1)} = \partial_1\rho^{(1)}\,\delta_{i2} - \partial_2\rho^{(1)}\,\delta_{i1}.$$
(2.93)

On transforme de la façon similaire le premier terme du membre de droite de l'équation (2.91), et on obtient l'équation de transport de la vorticité en approximation anélastique :

$$\partial_{t}\omega_{i} + u_{m} \,\partial_{m}\omega_{i} = D_{ij} \,\omega_{j} - D_{jj} \,\omega_{i} + \frac{\varepsilon_{ijk}}{Re} \,\partial_{j} \left(\frac{1}{\rho^{(0)}} \,\partial_{\ell}\sigma_{k\ell}\right) - \frac{S}{S_{r}} \frac{1}{\rho^{(0)}} \left(\partial_{1}p^{(1)} \,\delta_{i2} - \partial_{2}p^{(1)} \,\delta_{i1}\right) + \frac{1}{\rho^{(0)}} \left(\partial_{1}\rho^{(1)} \,\delta_{i2} - \partial_{2}\rho^{(1)} \,\delta_{i1}\right).$$
(2.94)

On a utilisé  $d_3\rho^{(0)}/\rho^{(0)} = -S$  lorsque l'état final de l'instabilité est utilisé comme état de référence (voir équation (2.19)). Cette équation de transport de la vorticité appelle plusieurs commentaires. La totalité des termes présents dans l'équation compressible (2.88) apparaissent également ici, éventuellement sous forme dégénérée. Notons que le terme de dilatation des tourbillons  $-D_{jj}\omega_i$  peut également s'écrire sous la forme  $u_3\frac{d_3\rho^{(0)}}{\rho^{(0)}}\omega_i$  en utilisant l'équation de continuité anélastique. Le terme de contraintes visqueuses fait intervenir la masse volumique de l'état (0), c'est sa seule différence avec le terme compressible. Les plus grandes différences sont liées au terme barocline. Il est nul suivant z, et éclaté en plusieurs termes fonction de  $(\rho^{(0)}, p^{(1)})$  ou de  $(\rho^{(0)}, \rho^{(1)})$ .

Le terme de diffusion visqueuse  $\varepsilon_{ijk} \partial_j \left(\frac{1}{\rho^{(0)}} \partial_\ell \sigma_{k\ell}\right)$  peut être développé (on omet le nombre de Reynolds par souci de lisibilité). On a :

$$\varepsilon_{ijk} \partial_j \left( \frac{1}{\rho^{(0)}} \partial_\ell \sigma_{k\ell} \right) = \varepsilon_{ijk} \frac{1}{\rho^{(0)}} \partial_\ell \partial_j \left( \partial_\ell u_k + \partial_k u_\ell - \frac{2}{3} \delta_{k\ell} \partial_m u_m \right)$$

$$- \varepsilon_{i3k} \frac{d_3 \rho^{(0)}}{[\rho^{(0)}]^2} \partial_\ell \left( \partial_\ell u_k + \partial_k u_\ell - \frac{2}{3} \delta_{k\ell} \partial_m u_m \right)$$

$$= \frac{1}{\rho^{(0)}} \partial_{\ell\ell}^2 \omega_i - \frac{\varepsilon_{ijk}}{\rho^{(0)}} \partial_k \partial_j \frac{d_3 \rho^{(0)}}{\rho^{(0)}} u_3 + \frac{\varepsilon_{ijk}}{\rho^{(0)}} \frac{2}{3} \delta_{k\ell} \partial_\ell \partial_j \frac{d_3 \rho^{(0)}}{\rho^{(0)}} u_3 \qquad (2.95)$$

$$- \varepsilon_{i3k} \frac{d_3 \rho^{(0)}}{[\rho^{(0)}]^2} \left( \partial_{\ell\ell} u_k - \partial_k \frac{d_3 \rho^{(0)}}{\rho^{(0)}} u_3 + \frac{2}{3} \delta_{k\ell} \partial_\ell \frac{d_3 \rho^{(0)}}{\rho^{(0)}} u_3 \right)$$

$$= \frac{1}{\rho^{(0)}} \partial_{\ell\ell}^2 \omega_i + \varepsilon_{i3k} \frac{S}{\rho^{(0)}} \partial_{\ell\ell}^2 u_k + \varepsilon_{i3k} \frac{S^2}{3[\rho^{(0)}]^2} \partial_k u_3.$$

Et finalement :

$$\varepsilon_{ijk} \partial_j \left( \frac{1}{\rho^{(0)}} \partial_\ell \sigma_{k\ell} \right) = \frac{1}{\rho^{(0)}} \partial_{\ell\ell}^2 \omega_i + \frac{S}{\rho^{(0)}} \left( \partial_{\ell\ell}^2 u_1 \,\delta_{i2} - \partial_{\ell\ell}^2 u_2 \,\delta_{i1} \right) + \frac{S^2}{3[\rho^{(0)}]^2} \left( \partial_1 u_3 \,\delta_{i2} - \partial_2 u_3 \,\delta_{i1} \right).$$
(2.96)

Le terme de diffusion se simplifie donc en trois termes, le premier étant celui qu'on obtient dans le cadre de l'approximation de Boussinesq à l'équation (2.120). Les deux termes suivants sont des termes de compressibilité qui apparaissent en raison du caractère non-nul de la divergence de vitesse  $\partial_i u_i$ . Remarquons que dans la direction i = 3, la diffusion de vorticité se réduit à un terme très proche du terme de Boussinesq.

# 2.7.2.2 Développement asymptotique de l'équation compressible de transport de la vorticité

On calcule ici également l'équation de transport de la vorticité en approximation anélastique, mais cette fois suivant la branche basse de la procédure présentée en figure 2.3. Le point de départ est l'équation dimensionnée de transport de la vorticité en régime compressible (2.88), établie à la section 2.7.1.

$$\partial_t \omega_i + u_m \,\partial_m \omega_i = D_{ij} \omega_j - D_{jj} \,\omega_i + \varepsilon_{ijk} \,\frac{1}{\rho^2} \partial_j \rho \,\partial_k p + \varepsilon_{ijk} \,\partial_j (\frac{1}{\rho} \partial_m \sigma_{km}). \tag{2.97}$$

On veut réaliser un développement asymptotique de cette équation. De la même manière que pour l'établissement des équations de Navier-Stokes anélastiques, on choisit dans un premier temps un adimensionnement dans lequel la vitesse n'est pas spécifiée :

$$\begin{cases}
x = L x^{\star}, \\
u = U u^{\star}, \\
\rho = \rho_r \rho^{\star}, \\
p = \frac{\mathcal{R}}{\mathcal{M}_r} \rho_r T_r p^{\star}, \\
t = \frac{L}{U} t^{\star}.
\end{cases}$$
(2.98)

On obtient (étoiles omises) :

$$\partial_t \omega_i + u_m \,\partial_m \omega_i = D_{ij} \omega_j - D_{jj} \,\omega_i + \frac{1}{\gamma_r M a^2} \varepsilon_{ijk} \frac{1}{\rho^2} \partial_j \rho \,\partial_k p + \frac{1}{Re} \varepsilon_{ijk} \,\partial_j (\frac{1}{\rho} \partial_m \sigma_{km}), \quad (2.99)$$

où :

$$Re = \frac{\rho_r L \sqrt{g L}}{\mu}, \qquad \gamma_r M a^2 = \frac{U^2}{R T_r} \qquad \text{et} \qquad \mathcal{M}_r = \frac{2\mathcal{M}_H \mathcal{M}_L}{\mathcal{M}_H \mathcal{M}_L}, \tag{2.100}$$

 $\mathcal{M}_L$  et  $\mathcal{M}_H$  étant respectivement les masses molaires des fluides léger et lourd. On recherche la limite de l'équation (2.99) lorsque  $\gamma_r M a^2$  tend vers 0. Les grandeurs physiques sont décomposées suivant  $\gamma_r M a^2$ :

$$\rho(x, y, z, t) = \rho^{(0)}(z) + \gamma_r M a^2 \rho^{(1)}(x, y, z, t), 
p(x, y, z, t) = p^{(0)}(z) + \gamma_r M a^2 p^{(1)}(x, y, z, t).$$
(2.101)

Les vitesses, et les tenseurs linéairement dépendants de la vitesse, n'interviennent qu'à l'ordre 0 :

$$u_{i}(x, y, z, t) = u_{i}^{(0)}(x, y, z, t),$$
  

$$D_{ij}(x, y, z, t) = D_{ij}^{(0)}(x, y, z, t),$$
  

$$\sigma_{ij}(x, y, z, t) = \sigma_{ij}^{(0)}(x, y, z, t).$$
  
(2.102)

Concernant ces trois grandeurs  $u_i$ ,  $D_{ij}$  et  $\sigma_{ij}$ , les exposants (0) sont omis dans la suite pour plus de lisibilité. Les décompositions sont insérées dans l'équation (2.99) :

$$\partial_t \omega_i + u_m \,\partial_m \omega_i = D_{ij} \omega_j - D_{jj} \,\omega_i + \frac{\varepsilon_{ijk}}{\gamma_r M a^2} \frac{1}{[\rho^{(0)}]^2} \left( 1 - 2 \,\gamma_r M a^2 \frac{\rho^{(1)}}{\rho^{(0)}} \right) \\ \times \left( \partial_j \rho^{(0)} + \gamma_r M a^2 \partial_j \rho^{(1)} \right) \left( \partial_k p^{(0)} + \gamma_r M a^2 \partial_k p^{(1)} \right)$$

$$+ \frac{1}{Re} \varepsilon_{ijk} \,\partial_j \left[ \frac{1}{\rho^{(0)}} \left( 1 - \gamma_r M a^2 \frac{\rho^{(1)}}{\rho^{(0)}} \right) \partial_m \sigma_{km} \right],$$

$$(2.103)$$

en ayant noté que :

$$\frac{1}{\rho^n} = \frac{1}{[\rho^{(0)} + \gamma_r M a^2 \rho^{(1)}]^n} \approx \frac{1}{[\rho^{(0)}]^n} (1 - n \gamma_r M a^2 \frac{\rho^{(1)}}{\rho^{(0)}}) \qquad \forall n > 0.$$
(2.104)

Il s'agit maintenant de séparer les ordres. À l'ordre  $(\gamma_r M a^2)^{-1}$ , seul un terme apparaît :

$$\frac{\varepsilon_{ijk}}{\gamma_r M a^2} \frac{1}{[\rho^{(0)}]^2} \partial_j \rho^{(0)} \partial_k p^{(0)} = \frac{\varepsilon_{i33}}{\gamma_r M a^2} \frac{1}{[\rho^{(0)}]^2} d_3 \rho^{(0)} \partial_3 p^{(0)} = 0, \qquad (2.105)$$

car les grandeurs (0) ne dépendent que de z et  $\varepsilon_{i33}$  est nul.

C'est l'ordre  $(\gamma_r M a^2)^0$  qui fournit l'équation de transport de vorticité en approximation anélastique. Commençons par simplifier l'expression du terme barocline.

$$\begin{split} &\varepsilon_{ijk} \frac{1}{[\rho^{(0)}]^2} \left( -2 \frac{\rho^{(1)}}{\rho^{(0)}} \partial_j \rho^{(0)} \partial_k p^{(0)} + \partial_j \rho^{(1)} \partial_k p^{(0)} + \partial_j \rho^{(0)} \partial_k p^{(1)} \right) \\ &= \frac{1}{[\rho^{(0)}]^2} \left( \varepsilon_{ij3} \partial_j \rho^{(1)} \partial_3 p^{(0)} + \varepsilon_{i3k} d_3 \rho^{(0)} \partial_k p^{(1)} \right) \\ &= \frac{1}{[\rho^{(0)}]^2} \left[ -S_r \rho^{(0)} \left( \partial_2 \rho^{(1)} \delta_{i1} - \partial_1 \rho^{(1)} \delta_{i2} \right) + d_3 \rho^{(0)} \left( \partial_1 p^{(1)} \delta_{i2} - \partial_2 p^{(1)} \delta_{i1} \right) \right] \\ &= \frac{S_r}{\rho^{(0)}} \left( \partial_1 \rho^{(1)} \delta_{i2} - \partial_2 \rho^{(1)} \delta_{i1} \right) + \frac{d_3 \rho^{(0)}}{[\rho^{(0)}]^2} \left( \partial_1 p^{(1)} \delta_{i2} - \partial_2 p^{(1)} \delta_{i1} \right), \end{split}$$

où on a utilisé l'équilibre hydrostatique  $\partial_3 p^{(0)} = -S_r \rho^{(0)}$ . On obtient l'équation de transport de la vorticité en approximation anélastique, dans le système d'adimensionnement décrit par l'équation (2.98) :

$$\partial_{t}\omega_{i} + u_{m} \partial_{m}\omega_{i} = D_{ij} \omega_{j} - D_{jj} \omega_{i} + \frac{\varepsilon_{ijk}}{Re} \partial_{j} \left( \frac{1}{\rho^{(0)}} \partial_{\ell} \sigma_{k\ell} \right) + \frac{d_{3}\rho^{(0)}}{[\rho^{(0)}]^{2}} \left( \partial_{1}p^{(1)} \delta_{i2} - \partial_{2}p^{(1)} \delta_{i1} \right) + \frac{S_{r}}{\rho^{(0)}} \left( \partial_{1}\rho^{(1)} \delta_{i2} - \partial_{2}\rho^{(1)} \delta_{i1} \right).$$
(2.106)

Deux opérations restent à effectuer. La première est la renormalisation des variables  $\gamma_r M a^2 \phi^{(1)} \rightarrow \phi^{(1)}$ , qui donne :

$$\partial_{t}\omega_{i} + u_{m} \partial_{m}\omega_{i} = D_{ij} \omega_{j} - D_{jj} \omega_{i} + \frac{\varepsilon_{ijk}}{Re} \partial_{j} \left( \frac{1}{\rho^{(0)}} \partial_{\ell} \sigma_{k\ell} \right) + \frac{1}{\gamma_{r} M a^{2}} \frac{d_{3}\rho^{(0)}}{[\rho^{(0)}]^{2}} \left( \partial_{1} p^{(1)} \delta_{i2} - \partial_{2} p^{(1)} \delta_{i1} \right) + \frac{S_{r}}{\gamma_{r} M a^{2}} \frac{1}{\rho^{(0)}} \left( \partial_{1} \rho^{(1)} \delta_{i2} - \partial_{2} \rho^{(1)} \delta_{i1} \right).$$
(2.107)

La seconde est de définir l'échelle d'adimensionnement U laissée libre précédemment. On écrit  $U = \sqrt{g L}$ , et :

$$\gamma_r M a^2 = \gamma_r \frac{U^2}{\gamma_r R T_r} = \frac{g L}{R T_r} = S_r.$$
(2.108)

Il vient :

$$\partial_{t}\omega_{i} + u_{m} \partial_{m}\omega_{i} = D_{ij} \omega_{j} - D_{jj} \omega_{i} + \frac{\varepsilon_{ijk}}{Re} \partial_{j} \left( \frac{1}{\rho^{(0)}} \partial_{\ell} \sigma_{k\ell} \right) - \frac{S}{S_{r}} \frac{1}{\rho^{(0)}} \left( \partial_{1} p^{(1)} \delta_{i2} - \partial_{2} p^{(1)} \delta_{i1} \right) + \frac{1}{\rho^{(0)}} \left( \partial_{1} \rho^{(1)} \delta_{i2} - \partial_{2} \rho^{(1)} \delta_{i1} \right).$$
(2.109)

On a utilisé  $d_3\rho^{(0)}/\rho^{(0)} = -S$  lorsque l'état final de l'instabilité est utilisé comme état de référence (voir équation (2.19)). Comme annoncé, l'équation (2.109) est identique à l'équation (2.94). Le terme de diffusion visqueuse est développé et discuté précédemment, se reporter à l'équation (2.96).

## 2.7.3 En approximation de Boussinesq

On souhaite établir l'équation de transport de la vorticité en approximation de Boussinesq, dans le cadre de l'instabilité de Rayleigh-Taylor. Comme pour l'anélastique, on peut le faire de deux façons différentes (voir figure 2.4). Les équations obtenues par ces deux méthodes sont à nouveau identiques.



FIGURE 2.4 – Deux façons de calculer l'équation de transport de vorticité en approximation de Boussinesq.

# 2.7.3.1 Prise du rotationnel de l'équation de Boussinesq de conservation de la quantité de mouvement

Le point de départ est l'équation de transport de la vitesse en approximation de Boussinesq. Elle s'écrit :

$$\partial_t u_i + u_j \,\partial_j u_i = -\frac{1}{\rho^{(0)}} \partial_i p + \frac{\mu}{\rho^{(0)}} \partial_{jj}^2 u_i - \frac{A_t \rho^{(1)}}{\rho^{(0)}} g \,\delta_{i3}, \qquad (2.110)$$

où on a :  $\rho(x, y, z, t) = 1 + A_t \rho^{(1)}(x, y, z, t)$ , et le nombre d'Atwood At est défini en équation (2.5). L'équation (2.110) est adimensionnée, avec :

$$\begin{cases}
 u = \sqrt{A_t g L} u^*, \\
 \rho = \rho_r \rho^*, \\
 p = \rho_r U^2 p^* = \rho_r A_t g L p^*, \\
 t = \sqrt{\frac{L}{A_t g}} t^*,
 \end{cases}$$
(2.111)

où les grandeurs  $\star$  sont les grandeurs adimensionnées, les étoiles étant omises dans la suite.

$$\partial_t u_i + u_j \,\partial_j u_i = -\partial_i p + \frac{1}{Re} \partial_{jj}^2 u_i - \rho^{(1)} \delta_{i3}. \tag{2.112}$$

Le nombre de Reynolds est  $Re = \sqrt{gA_t} L^{3/2}(\rho^{(0)}/\mu)$ . Il reste à prendre le rotationnel pour aboutir à l'équation de transport de la vorticité. On applique donc l'opérateur  $\varepsilon_{ijk}\partial_j$ :

$$\partial_t \omega_i + u_m \,\partial_m \omega_i = -\varepsilon_{ijk} \,\partial_j u_m \,\partial_m u_k - \varepsilon_{ijk} \,\partial_j \partial_k p + \frac{1}{Re} \partial_{mm}^2 \omega_i - \varepsilon_{ijk} \delta_{k3} \,\partial_j \,\rho^{(1)}, \qquad (2.113)$$

où on a utilisé  $\omega_i = \varepsilon_{ijk} \partial_j u_k$ . Le terme  $\varepsilon_{ijk} \partial_j \partial_k p$  s'annule : il s'agit du produit entre un tenseur antisymétrique en (j, k) et d'un tenseur symétrique en ces mêmes indices. Quant au premier terme du membre de droite, il se réécrit (voir équation 2.87) :

$$\varepsilon_{ijk} \,\partial_j u_m \,\partial_m u_k = -D_{ij} \,\omega_j, \tag{2.114}$$

où D est le tenseur de déformation pure  $D_{ij} = \frac{1}{2}(\partial_j u_i + \partial_i u_j)$  et on a utilisé  $\partial_i u_i = 0$ . Le dernier terme du membre de droite s'exprime sous la forme

$$-\varepsilon_{ijk}\,\delta_{k3}\,\partial_j\rho^{(1)} = -\varepsilon_{ij3}\,\partial_j\rho^{(1)} = \partial_1\rho^{(1)}\delta_{i2} - \partial_2\rho^{(1)}\delta_{i1},\tag{2.115}$$

d'où :

$$\partial_t \omega_i + u_m \,\partial_m \omega_i = D_{ij} \,\omega_j + \frac{1}{Re} \partial_{mm}^2 \omega_i + \partial_1 \rho^{(1)} \delta_{i2} - \partial_2 \rho^{(1)} \delta_{i1}. \tag{2.116}$$

Concentration et masse volumique sont proportionnelles dans le cadre de l'approximation de Boussinesq, on a :

$$\rho = \rho^{(0)} + A_t \rho^{(1)} = 1 + A_t (2c^{(0)} - 1).$$
(2.117)

Le terme barocline de l'équation de vorticité est alors écrit de la façon suivante :

$$-\partial_2 \rho^{(1)} \,\delta_{i1} + \partial_1 \rho^{(1)} \,\delta_{i2} = 2\left(-\partial_2 c^{(0)} \,\delta_{i1} + \partial_1 c^{(0)} \,\delta_{i2}\right) \\ = 2\left(-\partial_2 c^{(0)\prime} \,\delta_{i1} + \partial_1 c^{(0)\prime} \,\delta_{i2}\right).$$
(2.118)

On obtient donc :

$$\partial_t \omega_i + u_m \,\partial_m \omega_i = D_{ij} \,\omega_j + \frac{1}{Re} \partial_{mm}^2 \omega_i + 2\left(-\partial_2 c^{(0)\prime} \,\delta_{i1} + \partial_1 c^{(0)\prime} \,\delta_{i2}\right). \tag{2.119}$$

Pour finir, on réécrit cette équation avec l'adimensionnement  $U = \sqrt{gL}$  et on obtient

$$\partial_t \omega_i + u_m \,\partial_m \omega_i = D_{ij} \,\omega_j + \frac{1}{Re} \partial_{mm}^2 \omega_i + 2 \,At \left( - \partial_2 c^{(0)\prime} \,\delta_{i1} + \partial_1 c^{(0)\prime} \,\delta_{i2} \right). \tag{2.120}$$

On constate la présence d'un terme de production barocline assez dégénéré, et nul selon z, comme en anélastique. Il ne dépend que des gradients horizontaux de concentration. L'équation pour la composante z de la vorticité est identique à l'équation écrite en turbulence homogène et isotrope. En particulier,  $\omega_z$  ne croît que par étirement de tourbillon.

## 2.7.3.2 Développement asymptotique de l'équation compressible de transport de la vorticité

De la même façon qu'en anélastique dans la partie 2.7.2.2, on utilise ici l'équation compressible de transport de la vorticité (2.88), à laquelle on fait subir un développement asymptotique. On commence par l'adimensionner, avec :

$$\begin{cases}
 u = \sqrt{A_t g L} u^*, \\
 \rho = \rho_r \rho^*, \\
 T = T_r T^*, \\
 p = \frac{\mathcal{R}}{\mathcal{M}_r} \rho_r T_r p^*, \\
 t = \sqrt{\frac{L}{A_t g}} t^*.
 \end{cases}$$
(2.121)

On obtient (étoiles omises) :

$$\partial_t \omega_i + u_m \,\partial_m \omega_i = D_{ij} \omega_j - D_{jj} \,\omega_i + \frac{1}{A_t S_r} \varepsilon_{ijk} \frac{1}{\rho^2} \partial_j \rho \,\partial_k p + \frac{1}{Re} \varepsilon_{ijk} \,\partial_j (\frac{1}{\rho} \partial_m \sigma_{km}), \quad (2.122)$$

où :

$$Re = \frac{\rho_r L^{3/2} \sqrt{A_t g}}{\mu}, \qquad S_r = \frac{g L \mathcal{M}_r}{\mathcal{R} T_r} \qquad \text{et} \qquad \mathcal{M}_r = \frac{2 \mathcal{M}_H \mathcal{M}_L}{\mathcal{M}_H \mathcal{M}_L}, \tag{2.123}$$

 $\mathcal{M}_L$  et  $\mathcal{M}_H$  étant respectivement les masses molaires des fluides léger et lourd. On recherche la limite de l'équation (2.122) lorsque  $A_t$  et  $S_r$  tendent simultanément vers 0, soit  $A_t/S_r = \hat{B} = \mathcal{O}(1)$ . Les grandeurs physiques sont décomposées suivant l'ordre en  $A_t$ :

$$\rho = \rho^{(0)} + A_t \rho^{(1)},$$

$$p = p^{(0)} + A_t p^{(1)} + A_t^2 p^{(2)}.$$
(2.124)

Les vitesses et tenseurs linéairement dépendants de la vitesse ne s'écrivent qu'à l'ordre 0 :

$$u_{i} = u_{i}^{(0)},$$
  

$$D_{ij} = D_{ij}^{(0)},$$
  

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^{(0)}.$$
  
(2.125)

Concernant ces trois grandeurs  $u_i$ ,  $D_{ij}$  et  $\sigma_{ij}$ , les exposants (0) sont omis dans la suite pour plus de lisibilité. Les décompositions sont insérées dans l'équation (2.122) :

$$\partial_{t}\omega_{i} + u_{m} \partial_{m}\omega_{i} = D_{ij}\omega_{j} - D_{jj}\omega_{i} + \frac{\varepsilon_{ijk}}{A_{t}^{2}\hat{B}} \frac{1}{[\rho^{(0)}]^{2}} (1 - 2A_{t}\frac{\rho^{(1)}}{\rho^{(0)}}) \\ \times \left\{ \partial_{j}\rho^{(0)} \partial_{k}p^{(0)} + A_{t} \left( \partial_{j}\rho^{(1)} \partial_{k}p^{(0)} + \partial_{j}\rho^{(0)} \partial_{k}p^{(1)} \right) \\ + A_{t}^{2} \left( \partial_{j}\rho^{(1)} \partial_{k}p^{(1)} + \partial_{j}\rho^{(2)} \partial_{k}p^{(0)} + \partial_{j}\rho^{(0)} \partial_{k}p^{(2)} \right) \right\}$$

$$+ \frac{1}{Re} \varepsilon_{ijk} \partial_{j} \left[ \frac{1}{\rho^{(0)}} (1 - A_{t}\frac{\rho^{(1)}}{\rho^{(0)}}) \partial_{m}\sigma_{km} \right],$$
(2.126)

en ayant noté que :

$$\frac{1}{\rho^n} = \frac{1}{[\rho^{(0)} + A_t \rho^{(1)}]^n} \approx \frac{1}{[\rho^{(0)}]^n} (1 - n A_t \frac{\rho^{(1)}}{\rho^{(0)}}) \qquad \forall n > 0.$$
(2.127)

Il s'agit maintenant de séparer les ordres. À l'ordre  $A_t^{-2}$ , seul un terme apparaît :

$$\frac{\varepsilon_{ijk}}{A_t^2 \hat{B}} \frac{1}{[\rho^{(0)}]^2} \partial_j \rho^{(0)} \partial_k p^{(0)} = 0.$$
(2.128)

Plusieurs raisons permettent de confirmer la nullité de ce terme : ni  $\rho^{(0)}$  ni  $p^{(0)}$  ne dépendent des variables d'espace. (cf. section 2.5). À l'ordre  $A_t^{-1}$  trois termes subsistent :

$$\frac{\varepsilon_{ijk}}{A_t^2 \hat{B}} \frac{1}{[\rho^{(0)}]^2} \left\{ A_t \left( \partial_j \rho^{(1)} \partial_k p^{(0)} + \partial_j \rho^{(0)} \partial_k p^{(1)} \right) - 2A_t \frac{\rho^{(1)}}{\rho^{(0)}} \partial_j \rho^{(0)} \partial_k p^{(0)} \right\} = 0.$$
(2.129)

La même raison que précédemment conduit à confirmer la nullité de cette expression : ni  $\rho^{(0)}$ ni  $p^{(0)}$  ne dépend des variables d'espace. Finalement, c'est l'ordre  $A_t^0$  qui fournit l'équation de transport de vorticité en approximation de Boussinesq. En considérant la nullité des termes  $\partial_j \rho^{(0)}$  et  $\partial_k p^{(0)}$ , il reste :

$$\partial_t \omega_i + u_m \,\partial_m \omega_i = D_{ij} \omega_j - D_{jj} \,\omega_i + \frac{\varepsilon_{ijk}}{[\rho^{(0)}]^2} \Big\{ \partial_j \rho^{(1)} \cdot \partial_k p^{(1)} \Big\} + \frac{\varepsilon_{ijk}}{Re} \,\partial_j (\frac{1}{\rho^{(0)}} \partial_m \sigma_{km}), \quad (2.130)$$

où la constante  $1/\hat{B}$  a été absorbée dans la pression  $p^{(1)}$ . Notons que dans les équations de Navier-Stokes en approximation de Boussinesq, la pression intervient à l'ordre 2. Dans l'équation (2.130), la pression  $p^{(2)}(x, y, z, t)$  n'intervient pas. L'équation (2.130) peut être simplifiée au moyen de l'équation de continuité,  $\partial_i u_i = 0$ :

$$\partial_t \omega_i + u_m \,\partial_m \omega_i = D_{ij} \omega_j + \varepsilon_{ijk} \,\partial_j \rho^{(1)} \,\partial_k p^{(1)} + \frac{1}{Re} \,\partial_{jj}^2 \omega_i, \qquad (2.131)$$

où on a également utilisé le fait que  $\rho^{(0)} = 1$ . En outre, le développement asymptotique de l'équation compressible de conservation de la quantité de mouvement fournit à l'ordre  $A_t^{-1}$  l'équation d'équilibre hydrostatique

$$\frac{1}{A_t}\partial_i p^{(1)} + \frac{\rho^{(0)}}{A_t}\delta_{i3} = 0.$$
(2.132)

D'où on déduit  $\partial_1 p^{(1)} = 0$ ,  $\partial_2 p^{(1)} = 0$  et  $\partial_3 p^{(1)} = -\rho^{(0)} = -1$ . L'expression du terme de production barocline se réduit de la façon suivante

$$\varepsilon_{ijk} \,\partial_j \rho^{(1)} \,\partial_k p^{(1)} = \left( \varepsilon_{123} \,\partial_2 \rho^{(1)} \,\partial_3 p^{(1)} + \varepsilon_{132} \,\partial_3 \rho^{(1)} \,\partial_2 p^{(1)} \right) \delta_{i1} \\ + \left( \varepsilon_{231} \,\partial_3 \rho^{(1)} \,\partial_1 p^{(1)} + \varepsilon_{213} \,\partial_1 \rho^{(1)} \,\partial_3 p^{(1)} \right) \delta_{i2} \\ + \left( \varepsilon_{312} \,\partial_1 \rho^{(1)} \,\partial_2 p^{(1)} + \varepsilon_{321} \,\partial_2 \rho^{(1)} \,\partial_1 p^{(1)} \right) \delta_{i3} \\ = -\partial_2 \rho^{(1)} \,\delta_{i1} + \partial_1 \rho^{(1)} \,\delta_{i2}.$$
(2.133)

On obtient alors la forme de l'équation de transport de la vorticité en approximation de Boussinesq

$$\partial_t \omega_i + u_m \,\partial_m \omega_i = D_{ij} \omega_j - \partial_2 \rho^{(1)} \,\delta_{i1} + \partial_1 \rho^{(1)} \,\delta_{i2} + \frac{1}{Re} \,\partial_{jj}^2 \omega_i, \qquad (2.134)$$

qu'on peut aussi écrire

$$\partial_t \omega_i + u_m \,\partial_m \omega_i = D_{ij} \omega_j + 2\left(-\partial_2 c^{(0)\prime} \,\delta_{i1} + \partial_1 c^{(0)\prime} \,\delta_{i2}\right) + \frac{1}{Re} \,\partial_{jj}^2 \omega_i. \tag{2.135}$$

Pour finir, on réécrit cette équation avec l'adimensionnement  $U = \sqrt{g L}$  et on obtient

$$\partial_t \omega_i + u_m \,\partial_m \omega_i = D_{ij} \omega_j + 2 \,At \left( - \partial_2 c^{(0)\prime} \,\delta_{i1} + \partial_1 c^{(0)\prime} \,\delta_{i2} \right) + \frac{1}{Re} \,\partial_{jj}^2 \omega_i. \tag{2.136}$$

Cette équation est identique à l'équation (2.120).

## 2.8 Équations de transport de l'énergie cinétique turbulente

On établit dans cette section l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente pour les modèles anélastique et de Boussinesq. De façon similaire à l'établissement des équations de transport de la vorticité, on peut utiliser deux méthodes. La première consiste à effectuer un développement asymptotique de l'équation de vorticité compressible. La seconde consiste à partir de l'équation de conservation de la quantité de mouvement anélastique ou de Boussinesq, et de réaliser le même calcul que celui effectué pour obtenir l'équation compressible de l'énergie cinétique turbulente. On montre que les deux méthodes fournissent les mêmes résultats pour l'approximation de Boussinesq. On ne présente qu'une seule des deux méthodes pour l'équation anélastique.

#### 2.8.1 En régime compressible

Dans le régime compressible, on définit l'énergie cinétique turbulente  $k_c$ , exprimée en fonction des fluctuations de Favre de vitesse :

$$k_c = \frac{1}{2}u_i'' u_i''. \tag{2.137}$$

On note  $\overline{}$  la moyenne de Reynolds,  $\tilde{}$  la moyenne de Favre, ' la fluctuation de Reynolds et " la fluctuation de Favre. L'équation dimensionnée de transport de  $k_c$  s'écrit (Souffland *et al.*, 2002)

$$\partial_t(\overline{\rho}\widetilde{k}_c) + \partial_\ell(\overline{\rho}\widetilde{u}_\ell\widetilde{k}_c) = -\partial_\ell(\overline{\rho}k_c u_\ell'') - \overline{\rho}u_i'' u_\ell''} \partial_\ell(\widetilde{u}_i) - \overline{u_i''} \partial_i \overline{p} \\ -\partial_i(\overline{u_i''p'}) + \overline{p'\partial_i u_i''} + \partial_\ell(\overline{u_i''\sigma_{i\ell}}) - \overline{\sigma_{i\ell}\partial_\ell u_i''},$$
(2.138)

Le terme de flottabilité  $\rho g \delta_{i3}$  de l'équation de Navier-Stokes n'apporte pas de contribution à cette équation, car il apparaît sous la forme  $\overline{u''_i \rho g} = \overline{(u - \widetilde{u})\rho g} = g(\overline{\rho u} - \overline{\rho u}) = 0.$ 

## 2.8.2 En approximation anélastique

On souhaite établir l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente  $k_a = \frac{1}{2}u'_iu'_i$ dans l'approximation anélastique. On peut utiliser deux méthodes pour calculer cette équation : développement asymptotique de l'équation compressible pour  $k_c$ , ou bien calcul direct à partir de l'équation de quantité de mouvement anélastique. On se contente ici du calcul direct.

Le point de départ de ce calcul est l'équation anélastique de conservation de la quantité de mouvement (2.33) :

$$\rho^{(0)} \left( \partial_t u_i + u_j \partial_j u_i \right) = -\frac{1}{S_r} \partial_i p^{(1)} + \frac{1}{Re} \partial_j \sigma_{ij} - \rho^{(1)} \delta_{i3}.$$
(2.139)

On multiplie cette équation par  $u_i$  pour obtenir l'équation d'énergie cinétique totale, qu'on moyenne :

$$\rho^{(0)}\left(\partial_t(\frac{1}{2}\overline{u_iu_i}) + \overline{u_j}\partial_j(\frac{1}{2}\overline{u_iu_i})\right) = -\rho^{(0)}\overline{u'_j\partial_j(\frac{1}{2}u_iu_i)} - \frac{1}{S_r}\overline{u_i\partial_ip^{(1)}} - \overline{u_i\rho^{(1)}}\delta_{i3} + \frac{1}{Re}\overline{u_i\partial_j\sigma_{ij}}.$$

$$(2.140)$$

Or on a :

$$\frac{1}{2}\overline{u_i u_i} = \frac{1}{2}\overline{u_i} \ \overline{u_i} + \overline{k_a}.$$
(2.141)

L'équation de transport de  $\frac{1}{2}\overline{u_i}\ \overline{u_i}$  est obtenue en moyennant l'équation (2.139) puis en multipliant le résultat par  $\overline{u_i}$ :

$$\rho^{(0)} \left( \partial_t (\frac{1}{2}\overline{u_i} \ \overline{u_i}) + \overline{u_j} \partial_j (\frac{1}{2}\overline{u_i} \ \overline{u_i}) \right) = -\rho^{(0)}\overline{u_i}\overline{u'_j}\partial_j u_i - \frac{1}{S_r}\overline{u_i}\partial_i\overline{p^{(1)}} - \overline{u_i}\overline{\rho^{(1)}}\delta_{i3} + \frac{1}{Re}\overline{u_i} \overline{\partial_j\sigma_{ij}}.$$

$$(2.142)$$

On soustrait maintenant l'équation (2.142) à l'équation (2.140) pour obtenir l'équation de transport de  $k_a$ :

$$\rho^{(0)}\left(\partial_t \overline{k_a} + \overline{u_j}\partial_j \overline{k_a}\right) = -\partial_j\left(\rho^{(0)} \overline{u'_j k_a}\right) - \frac{1}{S_r}\partial_i(\overline{u'_i p'^{(1)}}) + \frac{1}{S_r}\overline{p'^{(1)}}\partial_i u'_i - \rho^{(0)}\overline{u'_i u'_j}\partial_j \overline{u_i} - \overline{u'_i \rho^{(1)}}\delta_{i3} + \frac{1}{Re}\overline{\partial_j(u'_i \sigma_{ij})} - \frac{1}{Re}\overline{\sigma_{ij} D'_{ij}},$$
(2.143)

avec  $D'_{ij} = 1/2 (\partial_j u'_i + \partial_i u'_j)$ . Le terme de dissipation s'écrit  $\varepsilon = \frac{1}{Re} \overline{\sigma_{ij} D'_{ij}}$ . Comparée à l'équation compressible (2.138), on retrouve tous les termes. Mises à part les différences entre moyennes et fluctuations de Favre et de Reynolds, les termes sont proches. La masse volumique  $\rho^{(0)}$ , qui ne dépend que de z et est donc invariante pour la moyenne de Reynolds, intervient dans la plupart des différences. On note que le terme compressible  $\overline{u''_i \partial_i p'}$  fait apparaître la densité  $\rho^{(1)}$  dans sa version anélastique.

#### 2.8.3 En approximation de Boussinesq

On définit dans un contexte de Boussinesq l'énergie cinétique turbulente  $k_b$ , exprimée en fonction des fluctuations de Reynolds de vitesse :

$$k_b = \frac{1}{2}u'_i u'_i. (2.144)$$

Dans cette partie, l'équation de transport de  $k_c$  est développée asymptotiquement pour obtenir une équation de transport pour  $k_b$ .

## 2.8.3.1 Calcul direct à partir de l'équation de Boussinesq de conservation de la quantité de mouvement

Le point de départ est ici l'équation de Boussinesq de conservation de la quantité de mouvement dont l'adimensionnement est décrit par le système 2.111 :

$$\partial_t u_i + u_j \partial_j u_i = -\partial_i p^{(2)} + \frac{1}{Re} \partial_{jj}^2 u_i - \rho^{(1)} \delta_{i3}.$$
 (2.145)

On multiplie cette équation par  $u_i$  pour obtenir l'équation d'énergie cinétique totale :

$$\partial_t (\frac{1}{2} u_i u_i) + u_j \partial_j (\frac{1}{2} u_i u_i) = -u_i \partial_i p^{(2)} - u_i \rho^{(1)} \delta_{i3} + \frac{1}{Re} \Big( \partial_{jj}^2 (\frac{1}{2} u_i u_i) - \partial_j u_i \partial_j u_i \Big).$$
(2.146)

Moyennée, cette équation devient :

$$\partial_t (\frac{1}{2}\overline{u_i u_i}) + \overline{u_j} \partial_j (\frac{1}{2}\overline{u_i u_i}) = -\overline{u'_j \partial_j (\frac{1}{2}u_i u_i)} - \overline{u_i \partial_i p^{(2)}} - \overline{u_i \rho^{(1)}} \delta_{i3} + \frac{1}{Re} \Big( \partial_{jj}^2 (\frac{1}{2}\overline{u_i u_i}) - \overline{\partial_j u_i \partial_j u_i} \Big).$$

$$(2.147)$$

Or on a :

$$\frac{1}{2}\overline{u_i u_i} = \frac{1}{2}\overline{u_i} \ \overline{u_i} + \overline{k_b}.$$
(2.148)

L'équation de transport de  $\frac{1}{2}\overline{u_i}\ \overline{u_i}$  est obtenue en moyennant l'équation (2.145) puis en multipliant le résultat par  $\overline{u_i}$ :

$$\partial_t (\frac{1}{2}\overline{u_i} \ \overline{u_i}) + \overline{u_j} \partial_j (\frac{1}{2}\overline{u_i} \ \overline{u_i}) = -\overline{u_i}\overline{u'_j}\partial_j (u_i) - \overline{u_i}\partial_i\overline{p^{(2)}} - \overline{u_i}\overline{\rho^{(1)}}\delta_{i3} + \frac{1}{Re} \Big(\partial_{jj}^2 (\frac{1}{2}\overline{u_i} \ \overline{u_i}) - \partial_j\overline{u_i} \ \partial_j\overline{u_i}\Big).$$

$$(2.149)$$

On soustrait maintenant l'équation (2.149) à l'équation (2.147) pour obtenir l'équation de transport de  $k_b$ :

$$\partial_t \overline{k_b} + \overline{u_j} \partial_j \overline{k_b} = -\overline{\partial_j u'_j k_b} - \overline{u'_i u'_j} \partial_j \overline{u_i} - \overline{u'_i \partial_i p'^{(2)}} - 2 \overline{u'_i c} \delta_{i3} + \frac{1}{Re} \partial_{jj}^2 \overline{k_b} - \overline{\varepsilon}.$$
(2.150)

On a utilisé  $\rho^{(1)} = 2c - 1$ . La fonction de dissipation apparaît sous la forme

$$\overline{\varepsilon} = \overline{\varepsilon}_{jj}$$
 avec  $\overline{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{Re} \overline{\partial_k u'_i \partial_k u'_j}.$  (2.151)

## 2.8.3.2 Développement asymptotique de l'équation compressible de transport de l'énergie cinétique turbulente

# Calcul préliminaire : développement asymptotique des moyennes et fluctuations de Favre

On effectue un développement asymptotique de  $\phi$  pour un nombre d'Atwood considéré petit devant 1. On souhaite faire apparaître la moyenne de Reynolds. Pour une grandeur quelconque  $\phi$ , on peut écrire :

$$\begin{split} \widetilde{\phi} &= \frac{\overline{\phi\rho}}{\overline{\rho}}, \\ &= \frac{\overline{\phi(1+A_t\rho^{(1)})}}{\overline{1+A_t\rho^{(1)}}}, \\ &= \overline{\phi(1+A_t\rho^{(1)})}(\overline{1-A_t\rho^{(1)}}) + \mathcal{O}(A_t^2), \\ &= \overline{\phi} + A_t(\overline{\phi\rho^{(1)}} - \overline{\phi\rho^{(1)}}) + \mathcal{O}(A_t^2), \\ &= \overline{\phi} + A_t\left(\overline{(\overline{\phi}+\phi')\rho^{(1)}} - \overline{\phi\rho^{(1)}}\right) + \mathcal{O}(A_t^2), \end{split}$$
(2.152)

d'où le résultat :

$$\widetilde{\phi} = \overline{\phi} + A_t \,\overline{\phi' \rho^{(1)}} + \mathcal{O}(A_t^2). \tag{2.153}$$

Le calcul du développement asymptotique de la fluctuation de Favre  $\phi'' = \phi - \widetilde{\phi}$  est immédiat :

$$\phi'' = \phi' - A_t \,\overline{\phi'\rho^{(1)}} + \mathcal{O}(A_t^2). \tag{2.154}$$

## Calcul préliminaire : expression de $\widetilde{k_c}$ en fonction de $\overline{k_b}$

On souhaite calculer l'écart entre deux quantités :  $\tilde{k_c}$  et  $\bar{k_b}$ . Pour cela, un développement asymptotique de  $\tilde{k_c}$  est réalisé, à l'aide des relations établies précédemment en équations (2.153) et (2.154). Notons que dans le calcul qui suit, la moyenne de Favre ~ sera notée = pour des raisons de non-lisibilité d'un grand ~ sur toute une ligne.

$$\overline{k_{c}} = \frac{1}{2} \overline{\overline{u_{i}'' u_{i}''}}, 
= \frac{1}{2} \overline{\left\{ \overline{u_{i}' - A_{t} \overline{u_{i}' \rho^{(1)}} + \mathcal{O}(A_{t}^{2}) \right\}^{2}}, 
= \frac{1}{2} \overline{\left\{ \overline{u_{i}' u_{i}' - 2A_{t} u_{i}' \overline{u_{i}' \rho^{(1)}} + \mathcal{O}(A_{t}^{2}) \right\}}, 
= \overline{k_{b} - A_{t} u_{i}' \overline{u_{i}' \rho^{(1)}} + \mathcal{O}(A_{t}^{2}), 
= \overline{k_{b} - A_{t} u_{i}' \overline{u_{i}' \rho^{(1)}} + A_{t} \left( k_{b} - A_{t} u_{i}' \overline{u_{i}' \rho^{(1)}} \right)' \rho^{(1)} + \mathcal{O}(A_{t}^{2}), 
= \overline{k_{b}} + A_{t} \overline{k_{b}' \rho^{(1)}} + \mathcal{O}(A_{t}^{2}),$$
(2.155)

où on a utilisé  $\overline{u'_i} = 0$  pour la dernière étape. Et on obtient finalement (rappelons  $\overline{\overline{k_c}} \equiv \overline{k_c}$ ) :  $\widetilde{k_c} = \overline{k_b} + A_t \overline{\rho^{(1)}k'_b} + \mathcal{O}(A_t^2),$ (2.156)

qu'on peut aussi écrire :

$$\widetilde{k_c} = \overline{k_b} + A_t \left( \overline{\rho^{(1)} k_b} - \overline{\rho^{(1)}} \overline{k_b} \right) + \mathcal{O}(A_t^2).$$
(2.157)

On constate un écart d'ordre 1 en  $A_t$  entre  $\tilde{k_c}$  et  $\overline{k_b}$ , qui s'annule lorsque les fluctuations de masse volumique sont statistiquement indépendantes de l'énergie cinétique turbulente du modèle de Boussinesq  $k_b$ . En d'autres termes, l'écart entre  $\tilde{k_c}$  et  $\overline{k_b}$  s'annule si les mouvements de fluide à petite échelle n'ont pas de conséquence sur la fluctuation de masse volumique. Cela correspond à des effets de compressibilité considérés comme négligeables. Dans ce régime, le modèle compressible se comporte comme pour le modèle de Boussinesq, ce qu'on retrouve ici : si le terme correctif en  $A_t$  est nul, l'énergie cinétique turbulente compressible  $k_c$  se confond avec l'énergie cinétique turbulente de Boussinesq  $k_b$ .

#### Développement asymptotique

Le point de départ du développement asymptotique est l'équation compressible dimensionnée pour  $k_c$  (2.138). On adimensionne cette équation au moyen des relations définies en équation (2.121), et on obtient (étoiles omises) :

$$\partial_t(\overline{\rho}\widetilde{k}_c) + \partial_\ell(\overline{\rho}\widetilde{u}_\ell\widetilde{k}_c) = -\partial_\ell(\overline{\rho}k_c u_\ell'') - \overline{\rho}u_i'' u_\ell'' \partial_\ell(\widetilde{u}_i) + \frac{1}{A_t S_r} \left(\overline{u_i''}\partial_i \overline{p} - \overline{u_i''}\partial_i p'\right) + \frac{1}{Re} \left(\partial_\ell(\overline{u_i''}\sigma_{i\ell}) - \overline{\sigma}_{i\ell}\partial_\ell u_i''\right),$$

$$(2.158)$$

les expressions de  $A_t$ , Re et  $S_r$  étant fournies en équations (2.5) et (2.123). On recherche la limite de l'équation (2.158) lorsque  $A_t$  et  $S_r$  tendent simultanément vers 0, ce qu'on peut écrire  $A_t/S_r = \hat{B} = \mathcal{O}(1)$ . Les grandeurs physiques sont décomposées suivant l'ordre en  $A_t$ :

$$\rho = \rho^{(0)} + A_t \rho^{(1)} = 1 + A_t \rho^{(1)},$$
  

$$p = p^{(0)} + A_t p^{(1)} + A_t^2 p^{(2)}.$$
(2.159)

Les vitesses et tenseurs linéairement dépendants de la vitesse ne s'écrivent qu'à l'ordre 0 :

$$u_i = u_i^{(0)},$$
  
 $\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^{(0)}.$ 
(2.160)

Enfin, les opérateurs de Favre (moyenne et fluctuations) sont développés suivant les équations (2.153) et (2.154). À l'ordre  $A_t^{-2}$  il ne subsiste qu'un terme, ce qui s'écrit :  $-\overline{u'_i}\partial_i p'^{(0)} = 0$ . La pression de Boussinesq d'ordre 0,  $p^{(0)}$ , ne dépendant pas de l'espace, cette équation est bien vérifiée. À l'ordre  $A_t^{-1}$  on obtient :

$$\overline{u_i'\rho^{(1)}}\,\partial_i\overline{p^{(0)}} - \overline{u_i'\partial_ip'^{(1)}} = 0.$$
(2.161)

Le premier terme est nul car  $p^{(0)}$  ne dépend pas de l'espace. De plus,  $p^{(1)} = p^{(1)}(z,t)$ , et la fluctuation de Reynolds de cette grandeur est nulle. L'équation (2.161) est donc bien vérifiée. C'est à l'ordre  $A_t^0$  qu'on écrit l'équation de conservation de l'énergie cinétique turbulente  $k_b$  dans le contexte de Boussinesq. On a :

$$\partial_{t}(\overline{k_{b}}) + \partial_{\ell}(\overline{u_{\ell}}\overline{k_{b}}) = -\partial_{\ell}(\overline{k_{b}u_{\ell}'}) - \overline{u_{i}'u_{\ell}'}\partial_{\ell}\overline{u_{i}} - \overline{u_{i}'\partial_{i}p'^{(2)}} - \overline{u_{i}'\rho^{(1)}}\delta_{i3} + \frac{1}{Re} \left(\partial_{\ell}(\overline{u_{i}'\sigma_{i\ell}}) - \overline{\sigma_{i\ell}}\partial_{\ell}u_{i}'\right).$$

$$(2.162)$$

Les termes  $\partial_{\ell}(\overline{u'_i\sigma_{i\ell}}) - \overline{\sigma_{i\ell}\partial_{\ell}u'_i}$  peuvent être simplifiés. On remarque que :

$$\partial_{\ell}(\overline{u'_{i}\sigma_{i\ell}}) - \overline{\sigma_{i\ell}\partial_{\ell}u'_{i}} = \overline{u'_{i}\partial_{\ell}\sigma_{i\ell}},$$

$$= \overline{u'_{i}\partial_{\ell}\left(\partial_{\ell}u_{i} + \partial_{i}u_{\ell}\right)},$$

$$= \overline{u'_{i}\partial_{\ell\ell}^{2}u_{i}},$$

$$= \overline{u'_{i}\partial_{\ell\ell}^{2}u'_{i}},$$

$$= \overline{\partial_{\ell}(u'_{i}\partial_{\ell}u'_{i})} - \overline{\partial_{\ell}u'_{i}\partial_{\ell}u'_{i}},$$

$$= \partial_{\ell\ell}^{2}\overline{k_{b}} - \overline{\partial_{\ell}u'_{i}\partial_{\ell}u'_{i}}.$$

$$(2.163)$$

où  $\overline{\partial_\ell u'_i \partial_\ell u'_i}$  est un terme de dissipation, et où le caractère solénoïdal du champ de vitesse de Boussinesq a été utilisé. On a finalement :

$$\partial_{t}(\overline{k_{b}}) + \partial_{\ell}(\overline{u_{\ell}}\overline{k}_{b}) = -\overline{\partial_{\ell}u_{\ell}'k_{b}} - \overline{u_{i}'u_{\ell}'}\partial_{\ell}\overline{u_{i}} - \overline{u_{i}'\partial_{i}p'^{(2)}} - 2\overline{u_{i}'c}\,\delta_{i3} + \frac{1}{Re}\Big(\partial_{\ell\ell}^{2}\overline{k_{b}} - \overline{\partial_{\ell}u_{i}'}\partial_{\ell}u_{i}'\Big).$$

$$(2.164)$$

On a utilisé  $\rho^{(1)} = 2c-1$ . Comparons les équations (2.158) et (2.164). Les termes compressibles sont tous présents sous une forme simplifiée dans l'équation de Boussinesq. Le terme  $-\overline{u'_i\rho^{(1)}}\delta_{i3}$ 

provient de la décomposition asymptotique du terme  $-\overline{u_i''}\partial_i\overline{p}$ . Précisons le développement asymptotique de ce terme. Adimensionné, il devient

$$-\frac{1}{A_t S_r} \overline{u_i''} \partial_i \overline{p} \qquad \text{puis} \qquad -\frac{1}{A_t^2} \overline{u_i''} \partial_i \overline{p}. \tag{2.165}$$

L'équation de transport de  $k_b$  est l'ordre  $A_t^0$ , il faut donc une correction en  $A_t^2$  du terme  $-\overline{u_i''}\partial_i\overline{p}$ . Celui-ci en fournit trois :

- 1.  $-\overline{u_i'}\left(A_t^2 \partial_i \overline{p^{(2)}}\right)$  qui est nul.
- 2.  $-\left(-A_t \overline{u_i'\rho^{(1)}}\right) \left(A_t \partial_i \overline{p^{(1)}}\right)$  qu'on réécrit  $-A_t^2 \overline{u_i'\rho^{(1)}} \delta_{i3}$  (équilibre hydrostatique).
- 3.  $-\mathcal{O}(A_t^2) \partial_i \overline{p^{(0)}}$ . Le terme en  $\mathcal{O}(A_t^2)$  représente les composantes d'ordre élevé non calculées de l'équation (2.154). La pression  $p^{(0)}$  ne dépendant pas de l'espace, ce terme est nul.

Ainsi, le terme compressible  $-\overline{u''_i}\partial_i \overline{p}$  de l'équation (2.138) se transforme finalement en  $-\overline{u'_i}\rho^{(1)}\delta_{i3}$  dans l'équation de Boussinesq (2.164).

On note que les équations (2.164) et (2.150), obtenues par deux méthodes différentes, sont identiques.

Dans ce chapitre, le système Rayleigh-Taylor étudié a été présenté avec ses hypothèses en termes de géométrie. L'état initial correspond à l'équilibre hydrostatique instable du fluide lourd sur le fluide léger, tandis que l'état final est associé à un mélange total des fluides, qui reste stratifié de façon stable sous l'effet de la gravité. Les équations du mouvement, du mélange, de l'énergie interne et d'état ont été présentées dans le cadre Rayleigh-Taylor. La méthode des développements asymptotiques a permis d'établir différents modèles physiques, qui correspondent chacun à un domaine différent de compressibilités statique et dynamique. Il est également possible de discriminer les cinq modèles établis par leur support des modes de Kovásnay. Une discussion sur les conditions d'utilisation des modèles a eu lieu. Enfin, les équations de transport de la vorticité et de l'énergie cinétique turbulente ont été dérivées par deux méthodes pour les modèles anélastique et de Boussinesq. Les équations obtenues par développement asymptotique et calcul direct sont identiques.

# CHAPITRE 3 Le code Aménophis : méthodes numériques et informatiques

## Sommaire

3.1	$\mathbf{M\acute{e}t}$	hodes nu	1 mériques, principes généraux	<b>64</b>	
	3.1.1	Problèm	e de Stokes anélastique	66	
		3.1.1.1	Schéma temporel	67	
		3.1.1.2	Matrice d'influence et solutions élémentaires $\ldots \ldots \ldots \ldots$	68	
		3.1.1.3	Discrétisation Chebyshev	69	
		3.1.1.4	Équation pour la quantité de mouvement $\hdots \ldots \hdots \hddots \hdots \hdot$	70	
		3.1.1.5	Opérateur de pression	71	
		3.1.1.6	Cas $k = 0$	72	
		3.1.1.7	Contrôle du pas de temps	73	
	3.1.2	Méthode	e auto-adaptative	74	
<b>3.2</b>	Mét	hode nu	mérique pour les équations de Boussinesq	75	
	3.2.1	Opérate	urs d'Uzawa	75	
	3.2.2	Cas $k =$	0	76	
	3.2.3	Modes p	arasites de pression en approximation de Boussinesq	76	
		3.2.3.1	Étude des modes propres à partir d'une simulation numérique $\therefore$	76	
		3.2.3.2	Mise en évidence théorique	78	
3.3	Mod	lèle anél	astique : analyses complémentaires	<b>78</b>	
	3.3.1	État de	base	78	
	3.3.2	Modes p	arasites de pression en anélastique	79	
3.4	Amé	élioratio	ns pour les modèles anélastique et de Boussinesq	80	
	3.4.1	Schéma	temporel d'ordre 1 pour le premier cycle	80	
		3.4.1.1	Initialisation en vitesse	80	
		3.4.1.2	Initialisation en masse	80	
		3.4.1.3	Utilisation d'un schéma semi-implicite d'ordre 1 et implicite en		
			pression	81	
	3.4.2	Méthode	e itérative	82	
		3.4.2.1	Pression	82	
		3.4.2.2	Vitesses couplées	82	
		3.4.2.3	Concentration, température et vitesse horizontale	84	
		3.4.2.4	Initialisation des processus itératifs	85	
		3.4.2.5	Gain lié aux méthodes itératives	86	
	3.4.3	Adaptations et raffinement de grille			
		3.4.3.1	Changement du nombre de points de collocation	87	
		3.4.3.2	Optimisation du critère d'auto-adaptation	89	
		3.4.3.3	Exemples de mouvements d'interfaces pendant une simulation	91	
<b>3.5</b>	Tests	élémentaires, grille optimale	91		
------------	-------	---	-----		
3	.5.1	Dérivée et intégration Chebyshev	92		
3	.5.2	Dérivation d'une constante et transformation de coordonnées	93		
3	.5.3	Convergence exponentielle	94		
3	.5.4	Convergence temporelle	96		
3	.5.5	Découpage optimal en sous-domaines	97		
3	.5.6	Spectres de pression et de vitesse	100		
3.6	Para	llélisation du code Aménophis	101		
3	.6.1	Préambule : protocoles de programmation parallèle	102		
3	.6.2	Parallélisation hybride sur trois étages	103		
		3.6.2.1 Résultats des tests de performances	103		

Ce chapitre est dédié à la description des méthodes numériques utilisées pour la résolution des équations anélastiques et de Boussinesq. La méthode numérique a été établie en premier pour le système anélastique, qui présente des contraintes plus complexes que le modèle de Boussinesq. Dans un deuxième temps, l'algorithme a été réduit pour s'adapter au cas de Boussinesq. Dans une large mesure, les deux modèles partagent donc une même méthode numérique.

Le cœur de la méthode a été mis au point et implanté dans le code de simulation par Zohra Hammouch pendant sa thèse (Hammouch, 2012). Les principaux éléments de la méthode sont rappelés, et on s'attarde sur les modifications et améliorations apportées à la méthode. Celle-ci est décrite dans son ensemble dans une publication récente (Schneider *et al.*, 2015). En particulier, l'implantation du modèle anélastique est finalisée et une nouvelle fonction d'adaptation est définie pour l'algorithme d'auto-adaptation de la grille. Un schéma itératif est ajouté pour la résolution des équations anélastiques et de Boussinesq et le premier cycle en temps est désormais calculé avec un schéma temporel spécifique. Les modes parasites de pression sont analysés dans les cas anélastique et de Boussinesq.

Des tests et mesures élémentaires rendent ensuite compte des propriétés de la méthode en conditions de fonctionnement, et on aborde en fin de chapitre la parallélisation utilisée pour permettre le lancement du code sur jusqu'à 2000 cœurs environ.

# 3.1 Méthodes numériques, principes généraux

Le système des équations anélastiques à résoudre a été établi dans le chapitre 2. Il s'agit des équations de la quantité de mouvement (2.33) avec la contrainte (2.25), l'équation de concentration (2.35) et de l'équation de température, établie à partir de l'équation d'énergie interne (2.34) avec l'égalité (2.37). L'équation d'état linéarisée est l'équation (2.30). Rappelons la décomposition des grandeurs thermodynamiques, définie en (2.36).

L'état initial peut être représenté par le schéma de la figure 3.1. L'équation de l'équilibre hydrostatique pour la masse volumique (2.15) est réécrite pour le raccord de la discontinuité en t = 0, avec :

$$H_{\pm}(z) = \frac{1}{2} (1 \pm \operatorname{erf}(\frac{z}{\delta})).$$
(3.1)

La grandeur  $\delta$  représente la largeur de la pseudo-interface initiale. La concentration est à nouveau obtenue par division  $c^{(\text{ini})} = \rho_H^{(\text{ini})} / \rho^{(\text{ini})}$  et la pression par intégration analytique de l'équation d'équilibre hydrostatique  $p^{(\text{ini})}(z) = -Sr \int \rho^{(\text{ini})}(z) dz$ . Quant à la température, à

la différence de l'état initial idéal isotherme établi pour l'étude des modèles physiques, on choisit cette fois de la calculer par l'équation d'état. Le profil de température initial est ainsi légèrement différent de  $T^{(\text{ini})} = 1$  en raison du caractère non-nul de  $\delta$ .



FIGURE 3.1 – Etat initial pour les simulations numériques. Les parois verticales sont immatérielles et périodiques. Les discontinuités de concentration et de masse volumique en z = 0 sont raccordées par les fonctions 3.1. La troisième dimension du domaine est  $L_y$  (perpendiculaire au schéma).

La forme particulière de l'équation de continuité (2.25) est source de difficultés. Dans le cas de Boussinesq, il existe de nombreuses méthodes pour découpler vitesse et pression dans le cadre des méthodes pseudo-spectrales (voir table 3.1). Elles ne sont pas toutes généralisables au cas anélastique. Le choix retenu est celui de la méthode d'Uzawa, en conjonction avec la méthode de la matrice d'influence.

Les conditions aux limites sont périodiques horizontalement; les deux parois physiques situées en haut et en bas du domaine de simulation sont considérées glissantes et adiabatiques, c'est-à-dire :

$$\partial_z u_{1,2}|_{x,z=z_b,z_t;t} = u_3(x, z = z_b, z_t; t) = 0,$$
  

$$\partial_z T^{(1)}\Big|_{x,z=z_b,z_t;t} = \partial_z c|_{x,z=z_b,z_t;t} = 0.$$
(3.2)

La discrétisation spatiale s'appuie sur une méthode multidomaine Chebyshev dans la direction inhomogène z. Une transformation de coordonnées est définie dans chaque sous-domaine.

66	Chapitro 3	I o oodo	Amánophia .	móthodog	numóriquos	of inf	formation	00
00	Chapter 5.	Le coue	Amenopms :	methodes	numeriques	et m	ormatique	29

Découplage	Consistance	Coût en calcul
Uzawa (Arrow et al., 1968)	Oui	Élevé
Green ou matrice d'influence (Kleiser & Schumann, 1980))	Oui	Élevé
oreen ou mastree a mindence (Rieber & Schumann, 1500))	Oui	Lieve
		_
Time splitting (Chorin, 1968; Temam, 1969)	Non	Bas
Projection-Diffusion (Batoul et al., 1994)	Oui	Bas

TABLE 3.1 – Solveurs Boussinesq-Stokes pseudo-spectraux.

Horizontalement, les grandeurs sont décomposées en séries de Fourier. L'avancement en temps est calculé dans le domaine de Fourier avec un schéma Runge-Kutta d'ordre 2, semi implicite en trois étapes en configuration à faible encombrement mémoire (Canuto et al., 1988). Les équations de conservation de la quantité de mouvement et de continuité conduisent à un problème de Stokes et à une équation de Helmholtz, tandis que les équations de concentration et de température s'écrivent sous la forme d'équations de Helmholtz. Le problème de Stokes est résolu par l'utilisation combinée des méthodes d'Uzawa et de la matrice d'influence, les équations de concentration, température et vitesse horizontale étant résolues avec la méthode seule de la matrice d'influence. Pour toutes les variables, les équations sont résolues par méthode itérative. En outre, la position des interfaces entre les sous-domaines ainsi que la répartition des points de collocation sont auto-adaptées. Pour le problème de Stokes, la méthode de la matrice d'influence implique l'écriture des inconnues sous forme de combinaison linéaire de cinq solutions élémentaires. Chacune d'entre elles est la solution d'un problème de Stokes doté de conditions aux limites particulières. Les coefficients de ces combinaisons linéaires sont solutions d'un système linéaire d'ordre 2(M+1), où M est le nombre de sous-domaines utilisés. Une méthode similaire est employée pour les équations de Helmholtz, avec trois solutions élémentaires et un système linéaire d'ordre M + 1 pour les coefficients de la décomposition.

Les équations du système linéaire sont écrites à travers les relations de raccord aux interfaces entre sous-domaines, qu'on détaille ici. Il est assez naturel d'imposer la continuité des vitesses et de la force qui s'exerce sur chaque surface élémentaire horizontale :

$$df_i = \left( (\partial_3 u_i + \partial_i u_3 - 2/3 \,\delta_{i3} \,\partial_\ell u_\ell) - p \,\delta_{i3} \right) dS, \qquad i = 1, 2, 3. \tag{3.3}$$

La continuité de cette force fournit la continuité des dérivées en z des composantes de vitesse, et la continuité de la pression. Notons que l'écriture de la dérivée selon la direction z de la contrainte (2.25) dans le domaine de Fourier montre la continuité de la dérivée seconde de la composante verticale de la vitesse.

# 3.1.1 Problème de Stokes anélastique

L'établissement des équations discrétisées commence par une décomposition de Fourier sur les directions horizontales

$$\phi^{(m)}(x,y,z,t) = \sum_{k_x = -N_x/2}^{N_x/2-1} \sum_{k_y = -N_y/2}^{N_y/2-1} \widetilde{\phi}^{(m)}_{k_x k_y}(z,t) e^{i(k_x x + k_y y)}, \qquad (3.4)$$

où m = 1, ..., M est le numéro du sous-domaine. Cette décomposition s'accompagne d'un changement de variables qui permet de partiellement découpler les équations de vitesses et de travailler avec des équations réelles :

$$k \, \widetilde{v}_{k}^{(m)} = \mathrm{i} \, k_{x} \, \widetilde{u}_{1,k}^{(m)} + \mathrm{i} \, k_{y} \, \widetilde{u}_{2,k}^{(m)},$$

$$k \, \widetilde{v}_{k}^{\perp (m)} = \mathrm{i} \, k_{x} \, \widetilde{u}_{1,k}^{(m)} - \mathrm{i} \, k_{y} \, \widetilde{u}_{2,k}^{(m)},$$
(3.5)

où  $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ ,  $k \ge 0$ . La vitesse verticale  $w \equiv u_3$  n'est pas modifiée. Après ces deux étapes on obtient le système suivant :

$$\rho^{(0)}(z) \partial_t \begin{pmatrix} \widetilde{v}_k \\ \widetilde{w}_k \end{pmatrix} = -\mathcal{G}_{A\,k} \, \widetilde{p}_k + \frac{1}{Re} \mathcal{L}_{A\,k} \begin{pmatrix} \widetilde{v}_k \\ \widetilde{w}_k \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \widetilde{s}_{v,k} \\ \widetilde{s}_{w,k} \end{pmatrix},$$

$$\rho^{(0)}(z) \, \partial_t \widetilde{v}_k^{\perp} = \frac{1}{Re} \, (\partial_{zz}^2 - k^2) \widetilde{v}_k^{\perp} + \widetilde{s}_{v,k}^{\perp}.$$
(3.6)

On note p la pression  $p^{(1)}$ . Les variables  $\tilde{v}_k$ ,  $\tilde{w}_k$ ,  $\tilde{v}_k^{\perp}$ ,  $\tilde{p}_k$ ,  $\tilde{s}_{v,k}$ ,  $\tilde{s}_{w,k}$  et  $\tilde{s}_{v,k}^{\perp}$  dépendent de (z,t). Les opérateurs  $\mathcal{G}_{Ak}$  et  $\mathcal{L}_{Ak}$  s'expriment sous la forme

$$\mathcal{G}_{A\,k} = \begin{pmatrix} k \, Sr^{-1} \\ Sr^{-1} \, \partial_z + \rho^{(0)}/p^{(0)} \end{pmatrix},$$

$$\mathcal{L}_{A\,k} = \begin{pmatrix} \partial_{zz}^2 - k^2 & \frac{1}{3} \, k \, L_{\rho}^{-1} \\ 0 & \partial_{zz}^2 - k^2 - \frac{1}{3} \, d_z L_{\rho}^{-1} - \frac{1}{3} \, L_{\rho}^{-1} \, \partial_z \end{pmatrix},$$
(3.7)

avec la contrainte

$$k\,\widetilde{v}_k + \left(\partial_z + L_\rho^{-1}\right)\widetilde{w}_k = 0,\tag{3.8}$$

où  $\tilde{s}_{v,k}$  et  $\tilde{s}_{v,k}^{\perp}$  sont les seconds membres obtenus en appliquant le changement de variables (3.5) au terme source

$$s_i = \rho^{(0)} \frac{T^{(1)}}{T^{(0)}} \delta_{i3} - \rho^{(0)} \frac{2 \operatorname{At} c^{(1)}}{1 + \operatorname{At} - 2 \operatorname{At} c^{(0)}} \delta_{i3} - \rho^{(0)} u_j \partial_j u_i, \qquad (3.9)$$

écrit dans l'espace de Fourier. Le terme de dérivée convective est considéré comme un terme source en raison de son traitement explicite en temps. La longueur de gradient de la masse volumique est notée  $L_{\rho}^{-1} = \rho^{(0)^{-1}} d_z \rho^{(0)}$ . L'équation (3.8) permet d'exprimer  $\tilde{v}_k$  en fonction de  $\tilde{w}_k$  lorsque k est non-nul. Le cas k = 0 est écarté pour le moment et sera traité à la section 3.1.1.6.

### 3.1.1.1 Schéma temporel

On applique un schéma Runge-Kutta d'ordre 2, semi implicite en trois étapes en configuration à faible encombrement mémoire (Le Creurer, 2005) au système (3.6). Trois sous-cycles en temps intermédiaires sont introduits  $t_q$ , q = 1, 2, 3, tels que  $t_n < t_1 < t_2 < t_3 = t_{n+1} = t_n + \Delta t$ . D'une manière générale, une étape du schéma s'écrit sous la forme

$$\begin{cases} \psi_{q+1} - \chi_{q+1} \Delta t \ \mathcal{G}_{q+1} = \psi_q + \beta_{q+1} \mathcal{H}_{q+1} + \chi_{q+1} \Delta t \ \mathcal{G}_q, \\ \mathcal{H}_{q+1} = \Delta t \ \mathcal{F}_{q+1} - \alpha_{q+1} \mathcal{H}_q, \\ q = 0, 1, 2. \end{cases}$$
(3.10)

où  $\mathcal{G}^{q+1}$  est le terme traité implicitement et  $\mathcal{H}_{q+1}$  le terme traité explicitement. Les valeurs des différents coefficients du schéma sont fournies par Canuto *et al.* (1988); Le Creurer (2005). Exprimons ces termes pour les modèles anélastiques et de Boussinesq. En formulation de Boussinesq, on a :

$$\begin{cases} \mathcal{G}_i^q = -\partial_i p^q + \frac{1}{Re} \partial_{jj}^2 u_i^q, \\ \mathcal{F}_i^q = -u_j^q \partial_j u_i^q - f_i^q, \\ f_i^q = A_t (2c^q - 1)\delta_{i3}. \end{cases}$$
(3.11)

En formulation anélastique ces termes s'écrivent :

$$\begin{cases} \mathcal{G}_{i}^{q} = -\frac{1}{\rho^{(0)}} \left( \frac{1}{Sr} \partial_{i} + \frac{\rho^{(0)}}{\rho^{(0)}} \delta_{i3} \right) p^{q} + \frac{1}{\rho^{(0)} Re} \left( \partial_{jj}^{2} u_{i}^{q} - \frac{1}{3} \partial_{i} (L_{\rho}^{-1} u_{3}^{q}) \right), \\ \mathcal{F}_{i}^{q} = -u_{j}^{q} \partial_{j} u_{i}^{q} - f_{i}^{q}, \\ f_{i}^{q} = \frac{T^{(1)}}{T^{(0)}} \delta_{i3} - \frac{2 At c^{(1)}}{1 + At - 2 At c^{(0)}} \delta_{i3}. \end{cases}$$

$$(3.12)$$

Dans les deux cas  $f_i^q$  est le terme de flottabilité. Le système matriciel (3.6) se réécrit :

$$\left[ \rho^{(0)}(z) \frac{\Gamma_q}{\Delta t} I_2 - \frac{1}{Re} \mathcal{L}_{Ak} \right] \begin{pmatrix} \widetilde{v}_k^{(q+1)} \\ \widetilde{w}_k^{(q+1)} \end{pmatrix} + \mathcal{G}_{Ak} \widetilde{p}_k^{(q+1)} = \begin{pmatrix} \widetilde{s}_{u,k}^{(q)} \\ \widetilde{s}_{w,k}^{(q)} \end{pmatrix},$$

$$\left[ \rho^{(0)}(z) \frac{\Gamma_q}{\Delta t} - \frac{1}{Re} (\partial_{zz}^2 - k^2) \right] \widetilde{v}_k^{\perp(q+1)} = \widetilde{s}_{v,k}^{\perp(q)},$$

$$(3.13)$$

où  $I_N$  est la matrice identité de taille  $N \times N$ . Les coefficients  $\Gamma_q$  sont liés au schéma Runge-Kutta et valent  $\Gamma_1 = 1/6$ ,  $\Gamma_2 = 5/24$  et  $\Gamma_3 = 1/8$ . L'indice (q) désigne le sous-cycle en temps. Les termes source sont écrits  $\widetilde{\bullet}_{,k}^{(q)}$ , où  $\bullet = s_v, s_w, s_v^{\perp}$ . À ce stade  $\widetilde{v}_k^{(q)}, \widetilde{v}_k^{(q)}, \widetilde{v}_k^{\perp(q)}, \widetilde{p}_k^{(q)}, \widetilde{s}_{v,k}^{(q)}, \widetilde{s}_{w,k}^{(q)}$  et  $\widetilde{s}_{v,k}^{\perp(q)}$  ne dépendent plus que de z. On remarque que l'équation pour  $v^{\perp}$  est une équation d'Helmholtz, de même que les équations de concentration et de température (voir Hammouch, 2012), dont le traitement est identique et n'est pas détaillé ici. La pression  $\widetilde{p}_k^{(q+1)}$  est calculée à chaque sous-cycle en temps de sorte que la contrainte

$$k \, \widetilde{v}_k^{(q+1)} + \left( d_z + L_\rho^{-1} \right) \, \widetilde{w}_k^{(q+1)} = 0, \tag{3.14}$$

est satisfaite.

# 3.1.1.2 Matrice d'influence et solutions élémentaires

Comme évoqué en introduction de ce chapitre, les variables de vitesse, pression, température et concentration sont décomposées en sous-solutions élémentaires. Les variables v, w et p s'écrivent sous la forme

$$\widetilde{\phi}_{k}^{(q+1)} = \widetilde{\phi}_{k}^{(q+1)(0)} + \sum_{s=1}^{4} \lambda_{s}^{\phi} \ \widetilde{\phi}_{k}^{(q+1)(s)}.$$
(3.15)

Le terme  $\tilde{\phi}_k^{(q+1)(0)}$  est la solution du problème élémentaire avec terme source et des conditions aux limites homogènes. Les quatre autres termes  $\tilde{\phi}_k^{(q+1)(s)}$  (s = 1, 2, 3, 4) sont solutions de problèmes sans second membre et avec des conditions aux limites Dirichlet non nulles. Les conditions de raccord entre sous-domaines obtenues par l'équation (3.3) et les conditions aux limites du domaine complet (3.2) fournissent un système linéaire dont les solutions sont les  $\lambda_s^{\phi}$ .

Le système différentiel pour  $\tilde{v}_k$  et  $\tilde{w}_k$  est solutionné avec les conditions aux limites suivantes :

$$\widetilde{v}_{k}^{(q+1)(s)}(z = z_{a}^{(m)}) = \delta_{1s}, \qquad \widetilde{v}_{k}^{(q+1)(s)}(z = z_{b}^{(m)}) = \delta_{2s}, 
\widetilde{w}_{k}^{(q+1)(s)}(z = z_{a}^{(m)}) = \delta_{3s}, \qquad \widetilde{w}_{k}^{(q+1)(s)}(z = z_{b}^{(m)}) = \delta_{4s},$$
(3.16)

où  $\delta$  est le symbole de Kronecker et  $m = 1, \ldots, M$ . Le sous-domaine (m) est délimité par les cotes  $z_a^{(m)}$  et  $z_b^{(m)}$ . On a  $z_b = z_a^{(1)}$  et  $z_t = z_b^{(m)}$ . Les quantités  $v^{\perp}$ , c et T sont décomposées de façon similaire pour s = 0, 1, 2.

Les solutions homogènes des problèmes élémentaires s = 1, 2, 3, 4 ou s = 1, 2 ne sont calculées qu'à chaque changement du pas de temps  $\Delta t$  et à chaque adaptation de grille. La solution inhomogène s = 0 est calculée à chaque cycle. Il reste maintenant à discrétiser dans la direction z et à appliquer la méthode d'Uzawa pour découpler vitesse et pression.

### 3.1.1.3 Discrétisation Chebyshev

Les équations (3.13)-(3.14) sont discrétisées dans la direction z au moyen de la méthode de collocation Chebyshev (Canuto *et al.*, 1988; Peyret, 2002; Guo *et al.*, 2013). La distribution des points de collocation est donnée par l'ensemble des M sous-domaines de  $N_z + 1$  points  $[z_a^{(m)}, z_b^{(m)}], m = 1, \ldots, M$ . Une transformation de coordonnées est calculée dans chaque domaine, on a :  $z^{(m)}(\xi) = f^{(m)}(\xi; a^{(m)})$ . La transformation ne dépend que du paramètre  $a^{(m)}$ :

$$f^{(m)}(\xi; a^{(m)}) = \frac{z_a^{(m)} + z_b^{(m)}}{2} + \frac{a^{(m)}\xi}{\sqrt{1 + b^{(m)^2} - \xi^2}}, \quad a^{(m)} \ge 0,$$
(3.17)

où  $b^{(m)} = 2a^{(m)}/(z_b^{(m)} - z_a^{(m)})$ . La limite  $a^{(m)} \to \infty$  redonne la distribution Gauss-Lobatto. La grille est ainsi définie par M - 1 positions d'interfaces entre sous-domaines et M paramètres de transformation de coordonnées. Ces 2M - 1 réels sont calculés dynamiquement par un algorithme d'auto-adaptation (voir section 3.1.2). La matrice de dérivation de taille  $(N_z + 1)$  est notée  $D = f'^{-1} D_{CGL}$  où  $D_{CGL}$  est la matrice de dérivation sur la distribution Gauss-Lobatto. Chaque grandeur discrétisée en z est ainsi écrite sous la forme d'un vecteur colonne, par exemple pour la pression :

$$\widetilde{P}_k^{(q)(s)} \equiv (\widetilde{p}_{k,0}^{(q)(s)} \dots \widetilde{p}_{k,N_z}^{(q)(s)})^T \quad \text{avec} \quad \widetilde{p}_{k,n}^{(q)(s)} \equiv \widetilde{p}_k^{(q)(s)}(z_n), \tag{3.18}$$

où les indices de sous-domaine (m) ont été omis par souci de clarté. Les grandeurs sont écrites avec une majuscule lorsqu'il s'agit d'un vecteur colonne obtenu par discrétisation Chebyshev de la variable continue (écrite avec une minuscule). Les conditions aux limites imposées dans le cadre de la décomposition en solutions élémentaires (3.16) indiquent que les vecteurs colonnes  $\widetilde{V}_k^{(q)(s)}$ ,  $\widetilde{W}_k^{(q)(s)}$  et  $\widetilde{V}_k^{\perp(q)(s)}$  ne contiennent que  $(N_z - 1)$  inconnues. Le problème peut donc être écrit avec des vecteurs colonnes restreints aux points intérieurs des domaines, suivant l'approche utilisée par Labrosse (2011). Ces vecteurs colonnes intérieurs contenant  $(N_z - 1)$ points sont notés  $\widetilde{V}_{k,I}^{(q)(s)}$ ,  $\widetilde{W}_{k,I}^{(q)(s)}$  et  $\widetilde{V}_{k,I}^{\perp(q)(s)}$ .

#### Équation pour la quantité de mouvement 3.1.1.4

Les équations écrites avec les variables intérieures prennent la forme

$$L_{Ak} \begin{pmatrix} \widetilde{V}_{k,I}^{(q+1)(s)} \\ \widetilde{W}_{k,I}^{(q+1)(s)} \end{pmatrix} + G_{Ak} \widetilde{P}_{k}^{(q+1)(s)} = \begin{pmatrix} \widetilde{S}_{v,k}^{(q)} \delta_{0s} + \widetilde{\Sigma}_{v,k}^{(q)(s)} \\ \widetilde{S}_{w,k}^{(q)} \delta_{0s} + \widetilde{\Sigma}_{w,k}^{(q)(s)} \end{pmatrix},$$
(3.19)

où  $s = 0, \ldots, 4$  et l'indice de sous-domaine (m) a été omis dans un souci de lisibilité. Les opérateurs  $G_{Ak}$  et  $L_{Ak}$  sont exprimés par

$$L_{Ak} = \begin{pmatrix} H_{Vk} & -\frac{k}{3} \frac{L_{\rho}^{-1}}{Re} I_{N_z - 1} \\ 0 & H_{Wk} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad G_{Ak} = \begin{pmatrix} \frac{k}{Sr} \underline{I} \\ \frac{1}{Sr} \underline{D} + \frac{\rho^{(0)}}{p^{(0)}} \underline{I} \end{pmatrix},$$
(3.20)

où  $H_{Vk}$  et  $H_{Wk}$  sont des matrices carrées de taille  $(N_z - 1)$ . Ce sont des opérateurs elliptiques donc inversibles et qui s'écrivent

$$H_{Vk} = \frac{\Gamma_q}{\Delta t} \rho_I - \frac{1}{Re} \left( -k^2 I_{N_z - 1} + D_I^2 \right),$$
  

$$H_{Wk} = \frac{\Gamma_q}{\Delta t} \rho_I - \frac{1}{Re} \left[ -k^2 I_{N_z - 1} + D_I^2 - \frac{1}{3} (D_I L_{\rho}^{-1}{}_I + L_{\rho}^{-1}{}_I D_I) \right],$$
(3.21)

où  $\rho_I$  et  $L_{\rho_I}^{-1}$  sont des matrices carrées diagonales de taille  $(N_z - 1)$  telles que  $(\rho_I)_{jj} =$  $\rho^{(0)}(z_j), \quad j = 1, \dots, N_z - 1$ . Les matrices <u>I</u> et <u>D</u> sont rectangulaires,  $(N_z - 1)$  lignes et  $(N_z + 1)$  colonnes, et définies par

$$\underline{I}_{\nu n} = (I_{N_z+1})_{\nu n} \\
\underline{D}_{\nu n} = D_{\nu n}$$
, pour
$$\begin{cases}
n = 0, \dots, N_z \\
\nu = 1, \dots, N_z - 1,
\end{cases}$$
(3.22)

La matrice  $D_I$  est carrée de taille  $(N_z - 1)$  et est constituée de l'intérieur de D. Les seconds membres  $\widetilde{S}_{u,k}^{(q)}$  et  $\widetilde{S}_{w,k}^{(q)}$  sont des vecteurs colonnes de taille  $(N_z - 1)$ , composés des termes intérieurs des seconds membres de la première équation du système (3.13).

Quant aux termes source  $\widetilde{\Sigma}_{u,k}^{(q)(s)}$  et  $\widetilde{\Sigma}_{w,k}^{(q)(s)}$ , ils sont liés aux conditions aux limites (3.16). En effet, si  $(X_p)$  est un vecteur de taille  $(N_z + 1)$  alors  $X'_p = \sum_{j=0}^{N_z} D_{pj} X_j$ , d'où

$$X'_{p,I} = X'_p - D_{p0}X_0 - D_{pN_z}X_{N_z}, \qquad p = 1, \dots, N_z - 1.$$
(3.23)

On a donc :

$$\begin{bmatrix} \widetilde{\Sigma}_{v,k}^{(q)(s)} \end{bmatrix}_{p} = \frac{1}{Re} \left( D_{p+1,0}^{2} \,\delta_{1s} + D_{p+1,N_{z}}^{2} \,\delta_{2s} \right), \\ \begin{bmatrix} \widetilde{\Sigma}_{w,k}^{(q)(s)} \end{bmatrix}_{p} = \frac{1}{Re} \left( D_{p+1,0}^{2} \,\delta_{3s} + D_{p+1,N_{z}}^{2} \,\delta_{4s} \right) \\ - \frac{1}{3Re} L_{\rho}^{-1}{}_{p+1} (D_{p+1,0} \,\delta_{3s} + D_{p+1,N_{z}} \,\delta_{4s}), \end{aligned}$$
(3.24)

pour  $p = 0, ..., N_z - 2$ .

Le même raisonnement permet d'obtenir une équation d'Helmholtz pour les composantes intérieures du vecteur  $\widetilde{V}_k^{\perp(q)(s)}$ 

$$\left[\rho_{I}\frac{\Gamma_{q}}{\Delta t} - \frac{1}{Re}(D_{I}^{2} - k^{2}I_{N_{z}-1})\right]\widetilde{V}_{k,I}^{\perp(q+1)(s)} = \widetilde{S}_{v,k}^{\perp(q)}\delta_{0s} + \widetilde{\Sigma}_{v,k}^{\perp(q)(s)},$$
(3.25)

où  $s = 0, \ldots, 2$ . Le terme source  $\widetilde{\Sigma}_{v,k}^{\perp(q)(s)}$  est lié aux conditions aux limites et s'exprime

$$\left[\widetilde{\Sigma}_{v,k}^{\perp(q)(s)}\right]_{p} = \frac{1}{Re} \left( D_{p+1,0}^{2} \,\delta_{1s} + D_{p+1,N_{z}}^{2} \,\delta_{2s} \right). \tag{3.26}$$

# 3.1.1.5 Opérateur de pression

L'équation de contrainte (3.14) s'écrit pour les points intérieurs

$$k\,\overline{I}\,\widetilde{V}_{k,I}^{(q+1)(s)} + \left(\overline{D} + L_{\rho}^{-1}\,\overline{I}\right)\widetilde{W}_{k,I}^{(q+1)(s)} = -\Sigma_{Dw}^{(q)(s)} - \Sigma_{vw}^{(q)(s)},\tag{3.27}$$

où les matrices  $\overline{I}$  et  $\overline{D}$  comprennent  $(N_z + 1)$  lignes et  $(N_z - 1)$  colonnes

$$\overline{I}_{n\nu} = (I_{N_z+1})_{n\nu}$$

$$\overline{D}_{n\nu} = D_{n\nu}$$

$$, \quad \text{pour} \quad \begin{cases} n = 0, \dots, N_z \\ \nu = 1, \dots, N_z - 1. \end{cases}$$

$$(3.28)$$

Quant aux termes source  $\Sigma_{Dw}^{(q)(s)}$  et  $\Sigma_{vw}^{(q)(s)}$ , ils proviennent des conditions aux limites et s'expriment sous la forme

$$\begin{bmatrix} \Sigma_{Dw}^{(q)(s)} \end{bmatrix}_{p} = D_{p+1,0}^{2} \,\delta_{3s} + D_{p+1,N_{z}}^{2} \,\delta_{4s}, \qquad p = 0, \dots, N_{z}, \\ \begin{bmatrix} \Sigma_{vw}^{(q)(s)} \end{bmatrix}_{0} = -k \,\delta_{1s} - L_{\rho}^{-1}{}_{0} \,\delta_{3s}, \\ \begin{bmatrix} \Sigma_{vw}^{(q)(s)} \end{bmatrix}_{p} = 0, \qquad p = 1, \dots, N_{z} - 1, \\ \begin{bmatrix} \Sigma_{vw}^{(q)(s)} \end{bmatrix}_{N_{z}} = -k \,\delta_{2s} - L_{\rho}^{-1}{}_{N_{z}} \,\delta_{4s}. \end{aligned}$$
(3.29)

Grâce à l'équation (3.27), on peut construire l'opérateur de pression  $A_{Pk}$  qui est tel que

$$A_{Pk} \tilde{P}_k^{(q+1)(s)} = F_{Pk}^{(q)(s)}.$$
(3.30)

Pour ce faire, les vitesses  $\widetilde{V}_{k,I}^{(q+1)(s)}$  et  $\widetilde{W}_{k,I}^{(q+1)(s)}$  sont exprimées en fonction de  $\widetilde{P}_{k}^{(q+1)(s)}$ . Les relations obtenues sont injectées dans l'équation de contrainte (3.27) et on obtient

$$A_{Pk} = -k^2 \,\overline{I} \, H_{Vk}^{-1} \left[ \frac{L_{\rho}^{-1} I}{3 \, Re} H_{Wk}^{-1} \left( \frac{1}{Sr} \,\underline{D} + \frac{\rho^{(0)}}{p^{(0)}} \underline{I} \right) + \frac{1}{Sr} \,\underline{I} \right] - \left( \overline{D} + L_{\rho}^{-1} \,\overline{I} \right) H_{Wk}^{-1} \left( \frac{1}{Sr} \,\underline{D} + \frac{\rho^{(0)}}{p^{(0)}} \underline{I} \right),$$

$$(3.31)$$

 $\operatorname{et}$ 

$$F_{Pk}^{(q)(s)} = -k\,\overline{I}\,H_{Vk}^{-1}\left[\frac{k}{3}\,\frac{L_{\rho}^{-1}}{Re}\,H_{Wk}^{-1}\left(\widetilde{S}_{w,k}^{(q)}\,\delta_{0s} + \widetilde{\Sigma}_{w,k}^{(q)(s)}\right) + \widetilde{S}_{v,k}^{(q)}\,\delta_{0s} + \widetilde{\Sigma}_{v,k}^{(q)(s)}\right] - \left(\overline{D} + L_{\rho}^{-1}\,\overline{I}\right)\,H_{Wk}^{-1}\left(\widetilde{S}_{w,k}^{(q)}\,\delta_{0s} + \widetilde{\Sigma}_{w,k}^{(q)(s)}\right) - \Sigma_{Dw}^{(q)(s)} - \Sigma_{vw}^{(q)(s)}.$$
(3.32)

Toutes les valeurs propres  $\lambda_n$   $(n = 1, ..., N_z + 1)$  de l'opérateur  $A_{P k \neq 0}$  sont positives dans la configuration  $k \neq 0$ . On définit le conditionnement de l'opérateur  $A_{P k \neq 0}$  par le réel  $\kappa = \frac{\max_n \lambda_n}{\min_n \lambda_n}$ . Un calcul numérique du conditionnement de l'opérateur pour des paramètres numériques et physiques raisonnables fournit la loi  $\kappa \sim (N_z + 1)^{3.95}$ . Ce conditionnement est très élevé, on s'attend à une amplification importante des erreurs numériques lors de l'utilisation de cet opérateur.

#### **3.1.1.6** Cas k = 0

Les équations discrétisées se simplifient pour le cas du premier mode de Fourier. Considérer k = 0 revient à éliminer toute dépendance horizontale au problème. La contrainte s'écrit :

$$(D + L_{\rho}^{-1}) \widetilde{w}_0 = 0, \qquad (3.33)$$

accompagnée des conditions aux limites. La vitesse  $\tilde{w}_0$  est  $C^2$  aux interfaces entre sousdomaines et on a  $\partial_z \tilde{w}_0 = 0$  aux parois solides inférieure et supérieure de la boîte. La solution est  $\tilde{w}_0 = 0$  sur tous les sous-domaines. Les équations continues à k = 0 s'écrivent donc :

$$\begin{bmatrix}
\rho^{(0)}(z) \partial_t - \frac{1}{Re} \partial_{zz}^2 \\
\left( \frac{1}{Sr} \partial_z + \frac{\rho^{(0)}}{p^{(0)}} \right) \widetilde{p}_0 = \widetilde{s}_{w,0}, \\
\widetilde{w}_0 = 0.
\end{cases}$$
(3.34)

L'équation pour  $\tilde{v}_0$  est une équation de Helmholtz, dans laquelle la pression  $\tilde{p}_0$  n'intervient pas. La pression est solution d'une équation différentielle du premier ordre, cette équation est le point clé de la résolution du cas k = 0. Ecrivons l'équation pour la pression sous la forme  $H_{p0}^{direct}\tilde{p}_0 = \tilde{s}_{w,0}$ , alors

$$H_{p\,0}^{direct} = \frac{1}{Sr} \,\partial_z + \frac{\rho^{(0)}}{p^{(0)}}.\tag{3.35}$$

La version discrétisée de cet opérateur est extrêmement mal conditionnée. On mesure un conditionnement de  $10^7$  sur un cas moyen 2D. Ecrivons maintenant l'opérateur d'Uzawa établi dans le cas général en équation (3.31), pour k = 0:

$$A_{P\,0} = -\left(\overline{D} + L_{\rho}^{-1}\,\overline{I}\right)H_{W\,0}^{-1}\left(\frac{1}{Sr}\,\underline{D} + \frac{\rho^{(0)}}{p^{(0)}}\underline{I}\right),\tag{3.36}$$

l'opérateur  $H_{W0}^{-1}$  se simplifiant un peu du fait de k = 0. On remarque que  $A_{P0}$  n'est pas la version discrète de l'opérateur direct (3.35). Un constat identique peut être fait pour les seconds membres. En fait, l'opérateur  $A_{P0}$  est « naturellement » préconditionné par rapport à l'opérateur direct. On en déduit qu'il existe trois méthodes pour résoudre l'équation de pression du système (3.34) :

- Discrétiser l'équation de pression du système (3.34) et la résoudre en inversant l'opérateurs teur de pression. Ce n'est probablement pas une bonne option, inverser des opérateurs basés sur la matrice de dérivation Chebyshev D menant souvent à des difficultés en raison notamment d'un conditionnement très élevé. Ceci peut provoquer des écarts à la convergence exponentielle de la discrétisation spectrale (Guo *et al.*, 2013).
- 2. Utiliser l'opérateur d'Uzawa à k = 0 comme suggéré par Peyret (2002). C'est la méthode « par défaut » utilisée dans le code de simulation avant que je réalise cette étude.
- 3. Résoudre analytiquement l'équation de pression. On remarque en effet que l'équation admet une solution de la forme

$$\widetilde{p}_0(z,t) = \left(\widetilde{P}_0(t) + Sr \int_{z_b}^z \widetilde{s}_{w,0}(\eta,t) e^{g(\eta)} d\eta \right) e^{-g(z)}, \qquad (3.37)$$

où

$$g(z) = Sr \int_{z_b}^{z} \frac{\rho^{(0)}(\lambda)}{p^{(0)}(\lambda)} d\lambda, \qquad (3.38)$$

et  $\widetilde{P}_0(t)$  est une constante d'intégration. Elle est déterminée en imposant la conservation de la masse. Pour calculer numériquement cette solution, il est nécessaire d'assembler la matrice de primitivation Chebyshev, en tenant compte des transformations de coordonnées. Cela a été fait en annexe A.

Les méthodes 2 et 3 ont été testées pour plusieurs simulations 2D de résolutions variées, et pour plusieurs valeurs du paramètre de raideur  $\delta$  (voir équation (3.1)). L'utilisation de l'opérateur d'Uzawa à k = 0 donne des résultats légèrement meilleurs pour des gradients peu raides (grandes valeurs de  $\delta$ ) et de bien meilleurs résultats pour les gradients raides (faibles valeurs de  $\delta$ ). Le choix de la méthode 2 est confirmé. Notons que l'opérateur de pression  $A_{P0}$ possède deux valeurs propres nulles. Il est donc inversé de façon partielle, selon l'algorithme suivant (Labrosse, 2011) :

- 1. Diagonalisation de l'opérateur  $D = P^{-1}A_{P0}P$ ,
- 2. Chaque élément de la matrice D est inversé ou maintenu à zéro si nul, on obtient  $D^{-1(partiel)}$ ,
- 3. L'inverse partiel est  $A_{P0}^{-1(partiel)} = PD^{-1(partiel)}P^{-1}$ .

Le cas k = 0 est également celui où sont réalisés les raccords en pression entre les sousdomaines. L'équilibre hydrostatique qui lie les profils de base de pression  $p^{(0)}$  et de masse volumique  $\rho^{(0)}$  conduit au constat suivant. Si  $\tilde{p}_0^{(m)}$  est solution de l'équation de pression (3.34), alors  $\tilde{p}_0^{(m)} + \alpha^{(m)} p^{(0)}$ , où  $m = 1, \ldots, M$  est le numéro du domaine, est aussi une solution de l'équation de pression. Raccorder la pression signifie trouver les valeurs des M inconnues  $\alpha^{(m)}$ . La pression étant continue à travers les interfaces entre sous-domaines, on écrit

$$\widetilde{p}_{0}^{(m)}(z_{b}^{(m)}) + \alpha^{(m)}p^{(0)}(z_{b}^{(m)}) = \widetilde{p}_{0}^{(m+1)}(z_{a}^{(m+1)}) + \alpha^{(m+1)}p^{(0)}(z_{a}^{(m+1)}), \quad m = 1, \dots, M - 1.$$
(3.39)

Attention à ne pas confondre l'indice inférieur 0 qui désigne le mode de Fourier k = 0 et l'indice supérieur (0) qui désigne l'état de base. La  $M^{\text{ème}}$  équation est fournie par la conservation totale de la masse  $\int \rho \, dV = C^{ste}$ , qu'on écrit

$$\sum_{m=1}^{M} \int_{z_{a}^{(m)}}^{z_{b}^{(m)}} \rho_{0}^{(m)}(z) \, dz = 0, \qquad (3.40)$$

et où on fait apparaître la pression grâce à l'équation d'état.

# 3.1.1.7 Contrôle du pas de temps

La partie diffusive des équations étant traitée implicitement, elle n'apparaît pas dans le critère de calcul du pas de temps. Dans le cadre des méthodes spectrales, on écrit un tel critère au moyen des nombres d'onde de coupure dans les directions de Fourier  $(N_x, N_y)$  et de Chebyshev  $(N_z + 1)$ :

$$\Delta t \le C \min_{m=1,M} \min_{i,j,k} \left[ \frac{N_x}{2} \frac{\left| u_{ijk}^{(m)} \right|}{K_{Adv}^{Fou}} + \frac{N_y}{2} \frac{\left| v_{ijk}^{(m)} \right|}{K_{Adv}^{Fou}} + \frac{(N_z+1)^2}{\left| f^{(m)\prime}(\xi_k) \right|} \frac{\left| w_{ijk}^{(m)} \right|}{K_{Adv/Dir}^{Che}} \right]^{-1}.$$
 (3.41)

Le facteur  $|f^{(m)'}(\xi_k)|$  vient de la transformation de coordonnées dans la direction Chebyshev (3.17). Les coefficients  $K_{Adv/Dir}^{Che}$  et  $K_{Adv}^{Fou}$  sont déterminés à travers une analyse de stabilité effectuée sur des cas tests élémentaires. La valeur  $K_{Adv/Dir}^{Che} = 7.39$  a été fixée dans une étude complète de stabilité sur un système Euler (Boudesocque-Dubois *et al.*, 2003). Le coefficient  $K_{Adv}^{Fou}$  est déterminé en considérant une équation d'advection du type  $\partial_t u + U \partial_x u = 0$ , où Uest une vitesse uniforme et constante. On aboutit à  $K_{Adv}^{Fou} = \frac{\sqrt{3}}{2\pi} \approx 0.2757$ . Le coefficient CFL global est pris égal à 0.9.

Le pas de temps sélectionné est le minimum des pas de temps calculés sur tous les sousdomaines. Dès que le pas de temps calculé par le critère de stabilité s'écarte de plus d'une tolérance fixée du pas de temps courant, celui-ci est recalculé. Cela implique notamment un nouveau calcul des opérateurs et des sous-solutions homogènes ( $s \neq 0$ ).

# 3.1.2 Méthode auto-adaptative

Pour des raisons expliquées à la section 1.3.4.2, il est très utile de bénéficier d'un maillage mobile pour étudier l'instabilité de Rayleigh-Taylor. La méthode d'Uzawa décrite dans ce chapitre est donc incluse dans un algorithme auto-adaptatif, afin de suivre du mieux possible les gradients de l'écoulement. Comme précisé à la section 3.1.1.3, la grille de points de collocation est défini par 2M - 1 paramètres qui sont autant de degrés de libertés. Les positions des interfaces et les paramètres de transformation de coordonnées sont dynamiquement calculés pendant les simulations. Cette méthode s'appuie sur un théorème classique de convergence, décrit par Canuto *et al.* (1988, Section 9.5) et par Peyret (2002, Section 3.6).

$$||u - P_N u||_{H^p_{\omega}(-1,1)} \le C N^{2p-\ell-\frac{1}{2}} ||u||_{H^{\ell}_{\omega}(-1,1)}, \quad \text{pour} \quad 1 \le p \le \ell,$$
(3.42)

où  $P_N u$  est l'approximation Chebyshev à l'ordre N de la fonction u dans  $H^{\ell}_{\omega}(-1,1)$ , pour  $\ell \geq 1$ . La norme de l'espace de Sobolev d'ordre p est définie par

$$||u||_{H^p_{\omega}(-1,1)}^2 = \sum_{k=0}^p \int_{-1}^{+1} \left| u^{(k)}(\zeta) \right|^2 \omega(\zeta) \mathrm{d}\zeta.$$
(3.43)

Le résultat de convergence (3.42) signifie que l'erreur de projection dans l'espace  $H^p_{\omega}$  est borné par la norme sur  $H^{\ell}_{\omega}$  de la fonction (Bayliss & Matkowsky, 1987; Guillard *et al.*, 1992; Gauthier *et al.*, 2005). Ainsi, l'optimisation consiste à minimiser une fonctionnelle définie comme la norme sur  $H^{\ell}_{\omega}$  d'une fonction test *u* bien choisie. Dans la pratique, la valeur  $\ell = 2$ donne de bons résultats, et on considèrera une fonctionnelle basée sur la dérivée première de la fonction test  $||u^{(1)}||_{H^{1}_{\omega}(-1,1)}$ . La dépendance de cette norme aux positions des interfaces et aux paramètres de transformation de coordonnées est le point clé.

Pour les problèmes à plusieurs variables, la fonction test  $\Phi$  est construite à partir des variables physiques  $\rho, u_i, \ldots$  La fonctionnelle totale  $J_2$  est définie par

$$J_{2}[\Phi] = \sum_{m=1}^{M} J_{2,\omega} \left[ \Phi^{(m)} \right], \qquad (3.44)$$

où  $\Phi^{(m)}$  est la restriction de la fonction test  $\Phi$  sur le  $m^{eme}$  sous-domaine. La fonctionnelle sur un sous-domaine est définie comme

$$J_{2,\omega}\left[\Phi\right] = \left\|\frac{d\Phi}{d\xi}\right\|_{1,\omega}^{2} = \sum_{i=1}^{2} \int_{-1}^{+1} \left|\frac{d^{i}\Phi}{d\xi^{i}}\right|^{2} \omega\left(\xi\right) d\xi,$$
(3.45)

où  $\omega(\xi) = (1-\xi^2)^{-1/2}$ . La transformation de coordonnées a été utilisée, de telle sorte que l'intégrale est calculée sur les points de collocation Gauss-Lobatto. Une procédure simple et robuste a été mise au point pour trouver les meilleures positions d'interface et les meilleurs paramètres de transformation de coordonnées. Voir Renaud & Gauthier (1997) et Peyret (2002, Section 8.3.4). L'algorithme consiste à calculer la fonctionnelle (3.44) en un ensemble de positions autour d'une interface entre sous-domaines. Pour chacun de ces calculs, la fonctionnelle a été minimisée par rapport au paramètre de transformation de coordonnées. La meilleure position pour l'interface considérée est donnée par le minimum de la norme de la fonctionnelle. Cette procédure est répétée pour chaque interface et itérée jusqu'à convergence. Cette opération appelée adaptation (de la grille de points de collocation) est effectuée chaque fois que le critère suivant est rempli

$$\max_{m=1,\dots,M} \left| \frac{J_2\left[\Phi^{(m)}\right]}{J_2^{ref}\left[\Phi^{(m)}\right]} - 1 \right| \ge \varepsilon,$$
(3.46)

où la valeur de référence  $J_2^{ref} \left[ \Phi^{(m)} \right]$  est la valeur de la fonctionnelle lors de la précédente adaptation, et  $\varepsilon$  est un niveau de tolérance. Dès que la variation de l'erreur de projection est plus grande que le niveau de tolérance, une redistribution de la position des interfaces et des points de collocation dans chaque domaine (transformation de coordonnées) est effectuée. En d'autres termes, les adaptations n'ont lieu que lorsque cela est nécessaire. Les erreurs numériques accompagnant les interpolations de l'ancienne grille vers la nouvelle sont donc minimisées comme montré par Gauthier *et al.* (2005, figure 3). Dans la pratique, on observe une adaptation tous les 100-200 cycles en temps environ.

# 3.2 Méthode numérique pour les équations de Boussinesq

Le modèle de Boussinesq a été ajouté au code de simulation pendant ma thèse.

# 3.2.1 Opérateurs d'Uzawa

D'un point de vue mathématique, les équations de Boussinesq ne sont pas très éloignées des équations (2.33)-(2.30). La vitesse et la pression sont solutions d'un problème de Stokes, l'équation de concentration est identique à l'équation (2.35) tandis que l'équation de température disparaît. Notons que la pression de Boussinesq a un rôle de multiplicateur de Lagrange, alors que la pression anélastique a aussi un sens thermodynamique. La contrainte est  $\partial_i u_i = 0$ , et les opérateurs d'Uzawa anélastiques se simplifient du fait que  $L_{\rho}^{-1} = 0$ .

Les opérateurs  $H_{Vk}$  et  $H_{Wk}$  sont identiques, on écrit  $H_{Vk} = H_{Wk} \equiv H_k$ . Les équations pour les composantes de vitesse  $\widetilde{V}_{k,I}^{(q+1)(s)}$  et  $\widetilde{W}_{k,I}^{(q+1)(s)}$  ne sont plus couplées. Dans le cadre de l'approximation de Boussinesq, le système (3.19) et l'équation (3.25) s'écrivent

$$H_{k} \widetilde{V}_{k,I}^{(q+1)(s)} + k \underline{I} \widetilde{P}_{k}^{(q+1)(s)} = \widetilde{S}_{v,k}^{(q)} \delta_{0s} + \widetilde{\Sigma}_{v,k}^{(q)(s)},$$

$$H_{k} \widetilde{W}_{k,I}^{(q+1)(s)} + \underline{D} \widetilde{P}_{k}^{(q+1)(s)} = \widetilde{S}_{w,k}^{(q)} \delta_{0s} + \widetilde{\Sigma}_{w,k}^{(q)(s)},$$

$$H_{k} \widetilde{V}_{k,I}^{\perp(q+1)(s)} = \widetilde{S}_{v,k}^{\perp(q)} \delta_{0s} + \widetilde{\Sigma}_{v,k}^{\perp(q)(s)},$$
(3.47)

où les termes source sont exprimés de manière adéquate. Les termes source  $\Sigma$  sont obtenus dans le cas de Boussinesq en considérant les expressions anélastiques avec l'hypothèse  $L_{\rho}^{-1} = 0$ .

L'opérateur de Helmholtz prend la forme

$$H_k = \frac{\Gamma_q}{\Delta t} - \frac{1}{Re} \left( -k^2 I_{N-1} + D_I^2 \right).$$
(3.48)

Etant donné la forme de l'équation de contrainte, l'équation anélastique (3.27) devient

$$k \,\overline{I} \,\widetilde{V}_{k,I}^{(q+1)(s)} + \overline{D} \,\widetilde{W}_{k,I}^{(q+1)(s)} = -\Sigma_{Dw}^{(q)(s)} - \Sigma_{vw}^{(q)(s)}.$$
(3.49)

L'équation pour la pression est ainsi très simplifiée par rapport aux relations anélastiques (3.30) et (3.31)

$$B_{Pk}\tilde{P}_{k}^{(q+1)(s)} = -k\overline{I}H_{k}^{-1}\left(\tilde{S}_{v,k}^{(q)}\delta_{0s} + \tilde{\Sigma}_{v,k}^{(q)(s)}\right) - \overline{D}H_{k}^{-1}\left(\tilde{S}_{w,k}^{(q)}\delta_{0s} + \tilde{\Sigma}_{w,k}^{(q)(s)}\right) - \Sigma_{Dw}^{(q)(s)} - \Sigma_{vw}^{(q)(s)},$$
(3.50)

où  $B_{P\,k}$  est l'opérateur d'Uzawa de pression dans l'approximation de Boussinesq

$$B_{Pk} = k^2 \,\overline{I} H_k^{-1} \underline{I} - \overline{D} H_k^{-1} \underline{D}. \tag{3.51}$$

#### 3.2.2Cas k = 0

Dans l'approximation de Boussinesq, les équations à k = 0 se réduisent à

$$\begin{bmatrix} \partial_t - \frac{1}{Re} \partial_{zz}^2 \end{bmatrix} \widetilde{v}_0 = \widetilde{s}_{v,0}, \\ \partial_z \widetilde{p}_0 = \widetilde{s}_{w,0}, \\ \widetilde{w}_0 = 0. \end{aligned}$$
(3.52)

Comme en anélastique, on utilise l'opérateur d'Uzawa, qui dispose d'un préconditionnement naturel, pour résoudre l'équation en pression du modèle de Boussinesq. Cet opérateur possédant une valeur propre nulle (voir section 3.2.3), il subit une inversion partielle suivant la procédure décrite en 3.1.1.6 pour le même problème en anélastique. La pression  $\tilde{p}_0$  est définie à une constante près qu'on note  $\beta$ , comme attendu pour un modèle de Boussinesq. Les équations de raccord s'écrivent

$$\widetilde{p}_0^{(m)}(z_b^{(m)}) + \beta^{(m)} = \widetilde{p}_0^{(m+1)}(z_a^{(m+1)}) + \beta^{(m+1)}, \quad m = 1, \dots, M - 1.$$
(3.53)

La conservation de la masse ne fournit pas d'information supplémentaire sur la pression, puisque la masse volumique ne dépend pas de la pression dans l'approximation de Boussinesq. On ajoute donc l'équation arbitraire  $\beta^{(1)} = 0$ , et toutes les constantes inconnues peuvent être déterminées.

#### 3.2.3Modes parasites de pression en approximation de Boussinesq

On s'intéresse ici aux valeurs propres nulles de l'opérateur de pression de Boussinesq.

#### 3.2.3.1Étude des modes propres à partir d'une simulation numérique

On s'appuie sur un début de simulation d'Aménophis, avec trois sous-domaines de  $N_z = 32$ points Chebyshev. C'est le domaine central qui porte la perturbation initiale à l'équilibre hydrostatique, on s'est concentré sur celui-ci pour étudier l'opérateur de pression. La répartition des points de la grille selon l'axe z est en Gauss-Lobatto.

L'opérateur  $B_{Pk=0}$  dispose de deux valeurs propres nulles, ou dit plus rigoureusement, une valeur propre nulle de multiplicité algébrique égale à deux. La matrice associée à l'opérateur étant diagonalisable, la multiplicité géométrique de la valeur propre 0 est nécessairement égale à deux, c'est-à-dire que la dimension du sous-espace propre engendré par les vecteurs propres associés à la valeur propre 0 est de deux. Ce résultat mathématique est confirmé par les mesures en cours de simulation : les deux vecteurs propres calculés par la routine Lapack DGEEV de diagonalisation de matrice sont linéairement indépendants. On peut observer ces deux modes sur la figure 3.2 (courbes bleues). Les deux vecteurs propres (ou modes) calculés peuvent être



FIGURE 3.2 – Vecteurs propres associés à la valeur propre 0 de l'opérateur de pression de Boussinesq  $B_{Pk=0}$  (bleu). Reconstitution des modes à partir de la nouvelle base (points rouges) - Gauche : premier mode - Droite : deuxième mode. L'abscisse est la coordonnée z.

combinés linéairement pour obtenir une autre base du sous-espace propre associé à la valeur propre 0. Ceci a un intérêt car on s'attendait à ce que l'un des deux modes soit une constante, conséquence de l'indétermination bien connue de la pression à une constante près pour les modèles de Boussinesq. On souhaite donc « découpler » les deux modes trouvés. Notons  $M_1$  et  $M_2$  les deux modes que nous venons d'observer et  $z_i = -\cos(i\pi/N_z)$ ,  $i = 1, \ldots, N_z$  la grille de Gauss-Lobatto. La base du sous-espace propre recherchée s'exprime de la façon suivante :

$$N_1^B(z_i) = 1, i = 1, \dots, N_z, N_2^B(z_i) = (-1)^i, i = 1, \dots, N_z. (3.54)$$

Les deux modes propres  $M_1^B$  et  $M_2^B$  mesurés depuis la simulation sont décomposés sur cette base :

$$M_1^B(z_i) = a_1 N_1^B(z_i) + b_1 N_2^B(z_i) = a_1 + b_1 (-1)^i, \qquad i = 1, \dots, N_z, M_2^B(z_i) = a_2 N_1^B(z_i) + b_2 N_2^B(z_i) = a_2 + b_2 (-1)^i, \qquad i = 1, \dots, N_z.$$
(3.55)

En comparant les termes de droite avec les résultats issus des simulations, on trouve les valeurs des coefficients  $a_1$ ,  $b_1$ ,  $a_2$  et  $b_2$ . Afin de juger de la qualité de la décomposition, on a tracé en points rouges sur la figure 3.2 les modes  $M_1^B$ ,  $M_2^B$  recalculés à partir des modes  $N_1^B$ ,  $N_2^B$  et des coefficients. Ces reconstructions se superposent parfaitement aux modes mesurés depuis Aménophis (traits bleus).

Le sous-espace propre associé à la valeur propre nulle est donc engendré par deux vecteurs propres (ou modes) dont l'expression est donnée en équation (3.54):

- une constante. On retrouve le fait que la pression est définie à une constante près dans un modèle de Boussinesq,
- un mode oscillant à la fréquence de coupure Chebyshev. Il s'agit d'un mode de pression parasite qui n'a pas de sens physique.

# 3.2.3.2 Mise en évidence théorique

Observons le système d'équations de Boussinesq (3.52) pour k = 0. La pression  $\tilde{p}_0$  n'apparaît que sous la forme de sa dérivée Chebyshev. La pression est donc définie à une constante près : on retrouve le premier mode propre mis en évidence à la section 3.2.3.1. Pour le second, reprenons le raisonnement de Peyret (2002, pages 222-223). En omettant l'indice k = 0, la décomposition Chebyshev de la pression à k = 0 s'écrit :

$$p(z_i) = \hat{p}_0 T_0(z_i) + \hat{p}_{N_z} T_{N_z}(z_i) + \sum_{j=1}^{N_z - 1} \hat{p}_j T_j(z_i), \qquad i = 1, \dots, N_z,$$
(3.56)

où l'indice associé à  $\hat{p}$  représente i<br/>ci le numéro du mode Chebyshev. La dérivée selon z s'écrit :

$$p'(z_i) = \hat{p}_{N_z} T'_{N_z}(z_i) + \sum_{j=1}^{N_z - 1} \hat{p}_j T'_j(z), \qquad i = 1, \dots, N_z.$$
(3.57)

Or  $T'_{N_z}$  s'annule sur les points Gauss-Lobatto, c'est-à-dire  $T'_{N_z}(z_i) = 0, i = 1, ..., N_z$ . Le coefficient  $\hat{p}_{N_z}$  est donc indéterminé. Le mode Chebyshev  $T_{N_z}(z_i), i = 1, ..., N_z$  est un mode parasite, et il correspond au deuxième mode trouvé par mesures depuis une simulation numérique.

Le premier mode propre associé à la valeur propre nulle rentre dans le cadre des raccords en pression et n'induit pas d'erreur dans les simulations. Quant au second, sa contribution est annulée lors de l'inversion partielle de l'opérateur d'Uzawa.

# 3.3 Modèle anélastique : analyses complémentaires

# 3.3.1 État de base

Les équations du modèle anélastique ont été établies dans la section 2.2. On rappelle la décomposition des variables physiques :

$$\phi(x, y, z, t) = \phi^{(0)}(z) + \gamma_r \operatorname{Ma}^2 \phi^{(1)}(x, y, z, t) + \dots$$
(3.58)

où  $\phi$  peut être la température, la masse volumique, la pression ou la concentration. La seule hypothèse donnée pour l'état (0) est sa dépendance exclusive à la coordonnée verticale z. Historiquement, l'état initial défini à la section 2.1.2.2 a été utilisé, l'avantage étant le caractère nul des perturbations  $\phi^{(1)}$  à t = 0. Les premières études détaillées des simulations ont fait apparaître des comportements étranges de la température et de la divergence de vitesse. En effet, l'écart anélastique au caractère solénoïdal du champ de vitesse peut s'écrire

$$\partial_i u_i = -u_z \frac{d_z \rho^{(0)}}{\rho^{(0)}} = -u_z L_\rho^{-1}.$$
(3.59)

Si  $\rho^{(0)}$  est le profil initial de masse volumique (voir figure 1.1), alors le saut en z = 0 induit des valeurs extrêmes pour sa dérivée en z = 0. Les effets de compressibilité sont donc quasiexclusivement localisés dans le plan z = 0, ce qui ne semble pas avoir de fondement physique. Il a donc été fait le choix d'utiliser l'état final complètement mélangé (défini à la section 2.1.2.3) pour l'état de base (0). Les artefacts de compressibilité et de température ont disparu. On note qu'il faut maintenant initialiser aussi les perturbations d'ordre (1) à l'instant initial,  $\phi^{(1)} = \phi_{initial} - \phi_{final}$ .

# 3.3.2 Modes parasites de pression en anélastique

On s'intéresse ici aux valeurs propres nulles des opérateurs de pression anélastique. Comme pour l'étude consacrée au modèle de Boussinesq à la section 3.2.3, on s'appuie sur un début de simulation en 3 sous-domaines de  $N_z = 32$  points, et on ne n'intéresse qu'au domaine central. Deux valeurs propres nulles sont trouvées, comme dans le cas de Boussinesq. Elles sont visibles figure 3.3 (courbes bleues). Ces deux modes, qu'on note ici  $M_1^A$  et  $M_2^A$ , forment une base du



FIGURE 3.3 – Vecteurs propres associés à la valeur propre 0 de l'opérateur de pression anélastique  $A_{Pk=0}$  (bleu). Reconstitution des modes à partir de la nouvelle base (points rouges) - Gauche : premier mode - Droite : deuxième mode. L'abscisse est la coordonnée z.

sous-espace propre de dimension 2 associé à la valeur propre 0 de l'opérateur  $A_{P k=0}$ . On souhaite trouver une autre base de ce sous-espace propre, par combinaison linéaire des deux modes issus du code de simulation. La pression de l'état de base  $p^{(0)}$  est un invariant pour la pression  $\tilde{p}_{k=0}$ , on recherche donc une base  $(N_1^A, N_2^A)$  du sous-espace propre associé à la valeur propre 0 sous la forme :

$$N_1^A(z_i) = p^{(0)}(z_i), \qquad i = 1, \dots, N_z, N_2^A(z_i) = (-1)^i, \qquad i = 1, \dots, N_z.$$
(3.60)

On décompose les vecteurs propres mesurés dans la simulation sur cette nouvelle base :

$$M_1^A(z_i) = a_1 N_1^A(z_i) + b_1 N_2^A(z_i) = a_1 p^{(0)}(z_i) + b_1 (-1)^i, \qquad i = 1, \dots, N_z, M_2^A(z_i) = a_2 N_1^A(z_i) + b_2 N_2^A(z_i) = a_2 p^{(0)}(z_i) + b_2 (-1)^i, \qquad i = 1, \dots, N_z.$$
(3.61)

On identifie les constantes  $a_1$ ,  $b_1$ ,  $a_2$  et  $b_2$  et on vérifie que les reconstructions des modes  $M_1^A$ et  $M_2^A$  (points rouges sur la figure 3.3) correspondent aux résultats issus de la simulation. La superposition est bonne. Les deux modes exprimés en équation (3.60) sont :

— la pression de base  $p^{(0)}$ ,

— Un mode parasite oscillant, c'est le mode de coupure Chebyshev.

De façon similaire au cas de Boussinesq, le premier mode propre associé à la valeur propre nulle rentre dans le cadre des raccords en pression et n'induit pas d'erreur dans les simulations. Quant au second, sa contribution est annulée lors de l'inversion partielle de l'opérateur d'Uzawa.

# 3.4 Améliorations pour les modèles anélastique et de Boussinesq

Plusieurs problématiques ne sont pas directement liées au modèle physique utilisé et concernent donc à la fois les modèles anélastique et de Boussinesq. Dans certains cas, le modèle compressible non décrit dans ce manuscrit est également concerné.

# 3.4.1 Schéma temporel d'ordre 1 pour le premier cycle

Le schéma temporel utilisé implique (notamment) que la pression à l'instant q est nécessaire pour calculer celle à l'instant q + 1. En particulier, la pression au cycle 0 est nécessaire pour calculer le cycle 1. En conséquence, il est nécessaire d'initialiser la pression. Dans la suite, on raisonne sur les équations de Boussinesq dans un souci de lisibilité. Le raisonnement tient cependant en approximation anélastique.

# 3.4.1.1 Initialisation en vitesse

On envisage d'initialiser l'instabilité en vitesse, c'est-à-dire de conserver une planéité parfaite de l'interface entre les deux fluides à t = 0 et d'imposer une vitesse non-uniforme aux fluides près de cette interface. Notons  $u^{ini}$  le champ de vitesse imposé. L'équation de la quantité de mouvement de Boussinesq s'écrit

$$\partial_t u_i^{ini} + u_j^{ini} \partial_j u_i^{ini} = -\partial_i P^{ini} + \frac{1}{Re} \partial_{jj}^2 u_i^{ini} - (2c^{ini} - 1)\delta_{i3}.$$
 (3.62)

Afin d'éliminer le premier terme, inconnu, on prend la divergence de cette équation. On a alors

$$\Delta P^{ini} = f(u^{ini}, c^{ini}), \tag{3.63}$$

où f est une fonction non précisée ici. Intégrer cette équation est malaisé en raison de l'absence de conditions aux limites bien définies pour la pression.

# 3.4.1.2 Initialisation en masse

Pour contourner ce problème, il a été envisagé d'initialiser la simulation en masse, c'est-àdire en perturbant l'interface géométrique qui délimite les deux fluides. La vitesse initiale est alors nulle, l'équation de conservation de la quantité de mouvement s'écrit à l'instant initial

$$\partial_i P^{ini} = (1 - 2c^{ini})\delta_{i3},\tag{3.64}$$

ou encore :

$$\begin{cases} \partial_x P^{ini} = 0, \\ \partial_y P^{ini} = 0, \\ \partial_z P^{ini} = (1 - 2c^{ini}). \end{cases}$$
(3.65)

On en déduit que  $P^{ini}$  ne dépend que de z. Or,  $c^{ini}$  dépend de x et de y. L'équation (3.64) n'admet pas de solution.

À la limite  $x_{ini} \to 0$ , où  $x_{ini}$  est l'amplitude de la perturbation initiale, la concentration  $c^{ini}$  se rapproche d'un profil 1D. On peut alors intégrer l'équation  $\partial_z P^{ini} = (1 - 2c^{ini})$  en acceptant de faire une erreur sur  $P^{ini}$  qu'on espère voir tendre vers 0. Cela a deux inconvénients. Premièrement, une amplitude  $x_{ini}$  faible implique un grand temps de simulation pour sortir de la phase linéaire et une difficulté à comparer la chronométrie des simulations avec les simulations compressibles déjà existantes. Ensuite, la pression utilisée n'étant pas la solution exacte de l'équation (3.64), le schéma Runge-Kutta reste mal initialisé. On observe des oscillations temporelles du champ de pression d'un sous-cycle en temps à l'autre, et donc d'un cycle à l'autre. Diminuer  $x_{ini}$  permet de diminuer l'amplitude jusqu'à un certain point, qu'on considère néanmoins comme trop élevé.

### 3.4.1.3 Utilisation d'un schéma semi-implicite d'ordre 1 et implicite en pression

Une autre solution est de calculer le premier cycle au moyen d'un schéma implicite en pression. Considérons le schéma semi-implicite d'Adams-Bashforth avec dérivation décentrée vers l'arrière (Peyret, 2002, pp. 115 et 133) :

$$\frac{3u_i^{n+1} - 4u_i^n + u_i^{n-1}}{2\Delta t} = 2 F_i^n - F_i^{n-1} + G_i^{n+1}, \qquad (3.66)$$

où  $F_i^n$  est le terme explicite et  $G_i^{n+1}$  est le terme implicite, qu'on identifie aux termes implicites et explicites du schéma Runge-Kutta. Pour n = 0 et  $u^{-1} = u^0$ , on obtient :

$$u_i^1 - \frac{2}{3}\Delta t \ G_i^1 = u_i^0 + \frac{2}{3}\Delta t \ F_i^0.$$
(3.67)

Ce schéma d'Adams-Bashforth dégénéré est implicite en pression. Afin de l'implanter dans le code de simulation Aménophis, on s'appuie sur la première étape du schéma Runge-Kutta à trois étapes (équation (3.10)) qui s'écrit

$$u_i^1 - \chi_1 \Delta t \ \mathcal{G}_i^1 = u_i^0 + \beta_1 \Delta t \ \mathcal{F}_i^0 + \chi_1 \Delta t \ \mathcal{G}_i^0.$$
(3.68)

La comparaison des équations (3.67) et (3.68) nous donne les valeurs des coefficients Runge-Kutta à utiliser pour retrouver le schéma d'Adams-Bashforth dégénéré :  $\beta_1 = \frac{2}{3}$ . Pour  $\chi_1$  la situation est plus compliquée. Ce coefficient doit prendre deux valeurs différentes, pour d'une part annuler la contribution de  $\mathcal{G}_i^0$  et d'autre part permettre la contribution de  $\mathcal{G}_i^1$ . On impose sa valeur à  $\frac{2}{3}$  dans la majeure partie de l'algorithme, sauf dans le calcul du second membre où on fixera spécifiquement sa valeur à 0. On applique évidemment aussi ce schéma temporel aux équations de concentration et de température.

La pression calculée par le schéma d'Adams-Bashforth dégénéré à l'ordre 1 se révèle être d'une bonne précision. L'amplitude des oscillations en pression évolue comme le pas de temps imposé au premier cycle (schéma d'ordre 1 en temps). Pour une simulation multimode anélastique 2D, un pas de temps de  $10^{-3}$  provoque des oscillations de pression d'une amplitude de  $10^{-7}$  environ. Cela est très satisfaisant. Dans le but de minimiser ces oscillations, on prend soin de démarrer les simulations avec un pas de temps plus petit d'un ordre de grandeur que le résultat fourni par le critère de stabilité (voir section 3.1.1.7). Dans la suite de la simulation, le pas de temps croît progressivement jusqu'à atteindre la valeur du critère de stabilité. Concernant l'initialisation, on travaille en vitesse, afin de conserver une cohérence avec les simulations compressibles déjà effectuées.

# 3.4.2 Méthode itérative

Un des problèmes apparus lors des premiers essais de simulations 3D du code a concerné l'occupation mémoire très importante, conséquence du stockage des opérateurs d'Uzawa. Dans le but de réduire l'occupation mémoire, et aussi d'améliorer la stabilité et la précision du code, il a été décidé d'implanter un schéma itératif. Les équations du modèle compressible du code sont historiquement résolues par méthode itérative, cela a servi de base pour la programmation des schémas itératifs des modèles anélastique et de Boussinesq.

On distingue plusieurs situations. Pour le modèle anélastique, les équations pour la concentration, la température et la vitesse  $\widetilde{V}_{k,I}^{\perp(q+1)(s)}$  sont des équations de Helmholtz qu'on peut traiter indépendamment. L'équation pour la pression  $\widetilde{P}_k^{(q+1)}$  est complexe pour les deux modèles. En ce qui concerne le modèle de Boussinesq, les équations pour  $\widetilde{V}_{k,I}^{(q+1)(s)}$  et  $\widetilde{W}_{k,I}^{(q+1)(s)}$  sont des équations de Helmholtz découplées ; elles sont couplées en anélastique et ne sont pas des équations de Helmholtz. Pour les deux modèles, résoudre ces équations de vitesse nécessite d'avoir calculé la pression  $\widetilde{P}_k^{(q+1)}$ . Les méthodes sont développées pour le cas le plus complexe, l'anélastique, et ensuite appliquées à l'approximation de Boussinesq.

# 3.4.2.1 Pression

Les opérateurs d'Uzawa de pression ont une forme complexe, exprimée dans l'équation (3.31) pour l'anélastique et (3.51) pour l'approximation de Boussinesq. Ces opérateurs n'ont pas de préconditionnement évident. On résout donc la pression en deux temps. Premièrement, l'inverse de l'opérateur d'Uzawa de pression est calculé et appliqué au second membre de l'équation de pression. On obtient une solution pour l'équation, entachée d'erreurs numériques liées au mauvais conditionnement de l'opérateur. Dans un deuxième temps, l'opérateur inverse est utilisé comme préconditionnement de la méthode itérative de Richardson

$$\widetilde{P}_{k\,(\ell+1)} = \widetilde{P}_{k\,(\ell)} + \alpha_R \, A_{P\,k}^{-1} \, (A_{P\,k} \widetilde{P}_{k\,(\ell)} - \widetilde{f}_k), \qquad (3.69)$$

où le numéro de l'itération est  $\ell$  et où on a omis l'indice de sous-cycle en temps (q). Ces itérations sont initialisées avec la solution directe de l'équation de la pression calculée en première étape. Le spectre de l'opérateur  $A_{Pk}^{-1} A_{Pk}$  est très proche de 1, les écarts sont uniquement dus aux erreurs numériques. Le paramètre de relaxation est donc fixé à une grande valeur  $\alpha_R = 0.95$ . La convergence est considérée atteinte lorsque le résidu atteint  $10^{-12}$ . Elle est vite atteinte : entre 3 et 6 itérations sont réalisées. Après l'inversion directe, le résidu d'une petite minorité de modes de Fourier n'atteint pas  $10^{-12}$ . Les itérations Richardson permettent de réduire ces résidus d'entre 2 et 4 ordres de grandeurs. Finalement, presque tous les modes présentent un résidu final de  $10^{-12}$ .

L'algorithme pour l'approximation de Boussinesq fonctionne de la même façon que l'anélastique. Dans le cas de la pression, la mise en place d'un schéma itératif a amélioré la précision du code sans diminuer sa consommation mémoire, puisqu'on passe toujours par la phase de résolution directe.

### 3.4.2.2 Vitesses couplées

Dans le cadre du modèle anélastique, les vitesses  $\widetilde{V}_{k,I}^{(q+1)(s)}$  et  $\widetilde{W}_{k,I}^{(q+1)(s)}$  sont couplées. Le système concerné est l'équation (3.19), la pression ayant été résolue au préalable et déplacée

dans le second membre. Il s'écrit donc sous la forme

$$L_{Ak} \begin{pmatrix} \hat{U} \\ \hat{w} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widetilde{S}_{v,k}^{(q)} \delta_{0s} + \widetilde{\Sigma}_{v,k}^{(q)(s)} \\ \widetilde{S}_{w,k}^{(q)} \delta_{0s} + \widetilde{\Sigma}_{w,k}^{(q)(s)} \end{pmatrix} - G_{Ak} \widetilde{P}_{k}^{(q+1)(s)}, \qquad (3.70)$$

avec

$$L_{Ak} = \begin{pmatrix} H_{Vk} & -\frac{k}{3} \frac{L_{\rho}^{-1}}{Re} I_{N_z - 1} \\ 0 & H_{Wk} \end{pmatrix}.$$
 (3.71)

Les expressions des opérateurs  $H_{Vk}$  (opérateur purement Helmholtz) et  $H_{Wk}$  (petit écart à un opérateur d'Helmholtz) sont données en équation (3.21). L'opérateur  $L_{Ak}$  n'est pas symétrique. Quand bien même les méthodes itératives conçues pour des opérateurs symétriques fonctionnent dans des cas non-symétriques (Fröhlich J. and Peyret R., 1990), on sélectionne une méthode compatible avec ces cas, à savoir la méthode à accélération Chebyshev (Orszag, 1980). Le schéma s'écrit

$$\varphi_{(\ell+1)} = \omega_{\ell} \,\varphi_{(\ell)} + (1 - \omega_{\ell}) \,\varphi_{(\ell-1)} + \alpha_1 \,\omega_{\ell} \, L_{A\,prec}^{-1} \, (L_A \varphi_{(\ell)} - f), \qquad (3.72)$$

où la variable  $\varphi$  représente le vecteur colonne  $(\widetilde{V}_{k,I}^{(q)} \quad \widetilde{W}_{k,I}^{(q)})^T$ . Les réels  $\alpha_1$  et  $\omega_\ell$  sont des paramètres de relaxation. Le coefficient  $\alpha_1$  peut être déterminé par l'expérience ou par analyse des valeurs propres. Le paramètre  $\omega_\ell$  s'exprime en fonction de  $\alpha_1$ . On définit  $\beta = \min\left( [1 - \alpha_1 m]^{-1}, [1 - \alpha_1 M]^{-1} \right)$  et on a

$$\omega_{\ell} = \frac{2\beta T_n(\beta)}{T_{n+1}(\beta)},\tag{3.73}$$

où  $T_{\ell}$  est le polynôme de Chebyshev d'ordre  $\ell$ . Le coefficient  $\omega_{\ell}$  varie donc au cours des itérations du schéma. Le coefficient  $\alpha_1$  est fixé par étude de convergence des équations d'Helmholtz pour la température, la concentration et la vitesse horizontale à la section 3.4.2.3.

Les deux composantes de vitesse sont calculées simultanément. L'opérateur  $L_{Ak}$  s'écrit comme un opérateur de taille  $(2 \times 2)$  par blocs et dispose d'un élément extra-diagonal lié au caractère non-solénoïdal du champ de vitesse. Dans un premier temps, on adapte le préconditionnement utilisé dans l'algorithme compressible du code (Gauthier, 1991). Il s'agit d'un opérateur tridiagonal par blocs basé sur l'approximation éléments finis des opérateurs  $H_{Vk}$ et  $H_{Wk}$ . Le paramètre  $\alpha_1$  est calibré à la valeur  $\alpha_1 = 0.98$ . Comme pour la pression, la convergence est considérée atteinte lorsque le résidu vaut  $10^{-12}$ .

Dans un deuxième temps, on a amélioré le préconditionnement. Il a été montré par Labrosse & Redondo (2011) que préconditionner l'opérateur Chebyshev  $D^2$  en volumes finis donne de meilleurs résultats. Cela a donc été implanté dans les versions anélastique et de Boussinesq d'Aménophis et testé. Les matrices de raideur en éléments finis et en volumes finis sont identiques. En revanche les matrices de masse sont différentes. Pour le calcul de la matrice volumes finis, on a notamment besoin des coordonnées des points de Gauss  $\chi_p = -\cos(\frac{(2p-1)\pi}{2N})$  en plus des points Gauss-Lobatto  $x_p = -\cos(p\pi/N)$ . On définit  $h_p = x_p - x_{p-1}$ . L'expression des coefficients de la matrice de masse volumes finis est définie ci-après. Sous-diagonale :

$$\frac{(x_p - \chi_p)^2}{2h_p}.$$
 (3.74)

Diagonale :

$$\frac{(x_p - \chi_p)(x_p + \chi_p - 2x_{p-1})}{2h_p} + \frac{(x_p - \chi_{p+1})(x_p + \chi_{p+1} - 2x_{p+1})}{2h_{p+1}}.$$
(3.75)

Sur-diagonale :

$$\frac{(x_p - \chi_{p+1})^2}{2h_{p+1}}.$$
(3.76)

Ce préconditionnement a été implanté et fonctionne. La convergence est en théorie plus rapide, en pratique on n'observe pas de différence mesurable dans notre cas, où il suffit d'une trentaine d'itérations pour converger. L'amélioration est inférieure à quelques pourcents, on conserve le préconditionnement éléments finis, plus simple.

Lors d'une simulation Rayleigh-Taylor, le nombre d'itérations diminue avec le temps. En effet, le pas de temps diminue, ainsi que la raideur du gradient initial de masse volumique. Pour ces raisons, on passe environ d'une trentaine d'itérations nécessaires en début de simulation à une quinzaine lorsque la couche de mélange apparaît.

Dans le cadre de l'approximation de Boussinesq, les équations pour  $\widetilde{V}_{k,I}^{(q+1)(s)}$  et  $\widetilde{W}_{k,I}^{(q+1)(s)}$ ne sont pas couplées. Il pourrait être judicieux de les résoudre indépendamment. Dans le cas où elles réclameraient un nombre d'itérations sensiblement différent pour converger, on gagnerait du temps de calcul. Cela est peu probable et n'a donc pas été implanté.

#### 3.4.2.3Concentration, température et vitesse horizontale

Les équations pour la concentration, la température et la vitesse horizontale sont des équations de Helmholtz. Ces trois grandeurs sont résolues indépendamment au moyen du schéma itératif utilisé pour les vitesses  $\widetilde{V}_{k,I}^{(q+1)(s)}$  et  $\widetilde{W}_{k,I}^{(q+1)(s)}$  (mais sans couplage). Le préconditionnement retenu est de type éléments finis. De même que pour les vitesses couplées, on utilise un schéma itératif à accélération de Chebyshev

$$L_{ap}\varphi_{(\ell+1)} = L_{ap} \left[ \omega_{\ell}\varphi_{(\ell)} + (1 - \omega_{\ell})\varphi_{(\ell-1)} \right] - \alpha_2 \,\omega_{\ell} \left( L_{sp}\varphi^{(\ell)} - f \right). \tag{3.77}$$

La variable  $\varphi$  représente la concentration, la température ou la vitesse horizontale, et  $L_{sp}$  est l'opérateur spectral associé à l'équation sur  $\varphi.$  On a :

$$L_{sp} = aI - b\left(D^2 - |K|^2\right), \tag{3.78}$$

où I est la matrice identité et a et b sont des constantes du temps et de l'espace. L'opérateur de préconditionnement de  $L_{sp}$  est noté  $L_{ap}$ . Les paramètres de relaxation du schéma sont  $\alpha_2$  et  $\omega_n$ . On souhaite obtenir des indications pour calibrer la constante  $\alpha_2$ . Pour cela, considérons l'opérateur  $L_{ap}^{-1}L_{sp}$ . Appelons M sa valeur propre maximale et m sa valeur propre minimale (en valeur absolue). Si  $L_{ap}$  est bien choisi, M et m sont proches de 1. On constate par expérience numérique  $m \approx 1$ . Pour un schéma itératif Richardson, on a la relation

$$\alpha_2 = \frac{2}{M+m},\tag{3.79}$$

qui peut donner une idée de valeur pour  $\alpha_2$  à partir d'une mesure de M. Au cours d'une simulation numérique, on observe que  $M_{estim} = 1.8$  est une majoration raisonnable des mesures. Plus  $\alpha_2$  est grand, plus la convergence est rapide, au détriment de la stabilité. Des tests sont donc réalisés avec différentes valeurs de  $M_{estim}$ , et pour les deux types de préconditionnement

$M_{estim}$	$\alpha_2$	$\beta$	$\beta + (\beta^2 - 1)^{1/2}$	Itérations	mesurées
				précond. EF	précond. VF
1.8	0.714	3.5	0.1459	31	31
1.4	0.833	6	0.0839	26	26
1.2	0.909	11	0.0455	23	23
1.05	0.976	41	0.0122	21	21
1.01	0.995	201	0.0025	20	20

TABLE 3.2 – Vitesse de convergence théorique et mesurée

abordés, éléments finis et volumes finis. Les résultats sont présentés dans le tableau 3.2. Il est possible d'établir que l'erreur diminue au moins d'un facteur  $\beta + (\beta^2 - 1)^{1/2}$  à chaque itération (Orszag, 1980). En théorie, passer de  $M_{estim} = 1.8$  à  $M_{estim} = 1.2$  accélère la convergence d'un facteur 3.2 environ. En pratique, elle est accélérée d'un facteur 1.32 au maximum. On observe une saturation du nombre d'itérations requises pour converger. Même avec des valeurs de  $M_{estim}$  (et donc de  $\alpha_2$ ) très proches de 1, le schéma reste stable. On ne mesure pas d'écart entre préconditionnement éléments finis et volumes finis. On retient finalement  $\alpha_2 = 0.976$ pour les simulations. Par rapport à la première valeur retenue  $\alpha_2 = 0.714$ , qui correspond à la mesure  $M_{estim} = 1.8$ , on mesure un gain de 30% environ sur le nombre d'itérations requises pour converger.

#### 3.4.2.4 Initialisation des processus itératifs

Les processus itératifs doivent être initialisés. Pour la pression, la situation est particulière puisqu'on initialise avec la solution de la méthode de résolution directe au même instant. On s'intéresse donc aux processus itératifs pour les autres variables, qui utilisent la méthode itérative à accélération de Chebyshev (3.72).

On distingue deux situations. La première est un démarrage ou redémarrage de calcul : on ne connait pas les sous-solutions au cycle précédent (elles ne sont pas sauvegardées dans le fichier de sauvegarde-reprise). Ceci arrive une fois toutes les 24 heures, délai qui correspond au temps de résidence continu maximum autorisé sur les supercalculateurs du CEA. Dans le cas général, on a déjà effectué au moins un cycle en temps, et on dispose donc de toutes les grandeurs au cycle précédent.

Les sous-solutions homogènes correspondent aux cas s = 1, 2, 3, 4 ou s = 1, 2 décrits à la section 3.1.1.2. Dans le cas général, on initialise les calculs itératifs avec la solution homogène calculée au précédent changement de pas de temps ou à la précédente adaptation de grille. Dans le cas de la reprise d'un calcul, on utilise l'initialisation suivante

$$\phi_{init}(z) = (a_{sup} - a_{inf}) \frac{z - z_{inf}}{z_{sup} - s_{inf}} + a_{inf}, \qquad (3.80)$$

où  $a_{inf}$  et  $a_{sup}$  sont les conditions aux limites de la grandeur  $\phi$ . Il s'agit de la portion de droite qui relie les valeurs aux frontières du sous-domaine. Cette initialisation est assez triviale mais fournit des résultats corrects et n'est utilisée que toutes les 24 heures de calcul. Les processus itératifs à la reprise d'un calcul réalisent quelques itérations de plus que dans le cas général. Concernant les sous-solutions inhomogènes s = 0, la situation est un peu plus complexe en raison d'optimisation mémoire sur les tableaux. Pour les grandeurs V et W, la solution au cycle en temps précédent est stockée. On l'utilise donc pour initialiser le processus itératif. En revanche, la solution inhomogène pour les variables  $V^{\perp}$ , T et c n'est pas stockée. On la reconstruit donc de manière approchée à partir de la solution complète au cycle précédent, et des sous-solutions homogènes du cycle courant.

Le calcul de la sous-solution inhomogène en vitesse pour V et w est initialisée avec la valeur du cycle précédent. Concernant  $V^{\perp}$ , T et c, procéder ainsi n'est pas possible : les sous-solutions inhomogènes ne sont pas stockées. L'initialisation est donc calculée à partir de la solution complète au cycle précédent et des sous-solutions homogènes au cycle courant. On « retranche »à la solution complète les sous-solutions homogènes, pour ne conserver que la contribution inhomogène s = 0. C'est la méthode utilisée dans la version compressible du code (Lafay, 2008). Pour T par exemple, on a :

$$\widetilde{T}_{k\ inho\ init}^{(s=0)}(z) = \widetilde{T}_{k}^{(q-1)}(z)$$
(3.81)

$$- \tilde{T}_{k}^{(q-1)}(z_{a}) \tilde{T}_{k}^{(q)(s=1)}(z)$$
(3.82)

$$- \tilde{T}_{k}^{(q-1)}(z_{b}) \tilde{T}_{k}^{(q)(s=2)}(z)$$
(3.83)

Cette initialisation fournit de bons résultats.

#### 3.4.2.5 Gain lié aux méthodes itératives

La pression est résolue de façon plus précise puisqu'on ajoute un mécanisme qui fait converger les modes de Fourier de la pression les plus imprécis. Concernant les composantes de vitesse, c'est plus difficile à quantifier. Les erreurs liées à la résolution directe peuvent varier au cours d'un calcul, alors que le résultat fourni par la méthode itérative est précis à la valeur de la tolérance choisie, c'est-à-dire à un résidu de  $10^{-12}$  près. On s'intéresse à un critère d'erreur macroscopique. La moyenne spatiale de la valeur absolue de l'équation de continuité est un bon candidat pour cela. Cette grandeur est définie par

$$E_A(t) = \operatorname{Moy}_{x_i, y_j, z_k} | \partial_\ell(\rho^{(0)} u_\ell) |, \qquad (3.84)$$

pour les simulations anélastiques et par

$$E_B(t) = \operatorname{Moy}_{x_i, u_i, z_k} | \partial_\ell u_\ell |, \qquad (3.85)$$

pour l'approximation de Boussinesq. Il est également possible de définir des erreurs similaires avec le maximum spatial :

$$E_A^{MAX}(t) = \operatorname{Max}_{x_i, y_j, z_k} \partial_\ell(\rho^{(0)} u_\ell), \qquad (3.86)$$

pour le modèle anélastique et

$$E_B^{MAX}(t) = \operatorname{Max}_{x_i, y_j, z_k} \partial_\ell u_\ell, \qquad (3.87)$$

dans le cas de Boussinesq. On commence une simulation 3D Boussinesq en méthode directe, puis on active la méthode itérative en milieu de calcul. La grille de points de collocation est constituée de 600 points de collocation dans les directions x et y, et de 24 domaines de 30 points dans la direction z, ce qui correspond à 259 millions de points de collocation. L'erreur  $E_B(t)$  passe de  $10^{-10}$  à  $10^{-11}$  lors de l'activation du schéma itératif, en un cycle Runge-Kutta. En termes d'occupation mémoire, on ne stocke plus les opérateurs liés à la concentration, la température et la vitesse horizontale. On doit par contre stocker en plus l'opérateur de pression, dont on ne stocke que l'inverse en méthode de résolution directe. On gagne 2 opérateurs par sous-cycle en temps, soit 6 opérateurs par cycle complet Runge-Kutta. Cela représente approximativement 25% de mémoire occupée en moins, ce qui n'est pas énorme mais tout de même intéressant, sachant qu'on a dans le même temps amélioré la précision du code.

En terme de temps de calcul, les méthodes itératives sont souvent perçues comme coûteuses. On souhaite donc mesurer et comparer les temps de calcul des résolutions directe et itérative du code de simulation. A priori, on peut supposer que la méthode itérative est plus lente pour le calcul des cycles mais plus rapide lors des adaptions de grille en raison du plus faible nombre d'opérateurs à recalculer. On relève quelques temps de calcul pour une simulation 3D Boussinesq de grille de points de collocation  $600 \times 600 \times (24 \times 30)$  (tableau 3.3). Notons que le nombre de cycles effectués est différent, c'est la raison pour laquelle on raisonne

Calcul	Cycles	Temps physique	Adaptations	Temps de	Temps par
		$t_{fin} - t_{ini}$	de grille	calcul	cycle (s)
Direct	493	0.71	1	7h28	54.5
Itératif	1440	0.24	3	23h01	57.5

TABLE 3.3 – Caractéristiques et temps de calcul pour les résolutions directe et itérative.

sur un temps de calcul par cycle. Le nombre de décompositions dynamiques par cycle est presque identique, ce qui rend pertinente la comparaison. On constate que ceux-ci sont très proches (6% d'écart). La résolution itérative n'est pas aussi lente que prévu.

Au final, l'algorithme itératif implanté pendant cette thèse dans le code Aménophis est plus précis, moins gourmand en mémoire et presque aussi rapide que l'algorithme direct précédent.

# 3.4.3 Adaptations et raffinement de grille

On présente dans un premier temps la méthode permettant de changer le nombre de points de la grille, au cours d'une simulation. Une fonction test adaptée aux simulations 3D effectuées est construite pour l'algorithme d'auto-adaptation. Enfin, on montre l'évolution de la position des interfaces au cours d'une simulation 3D.

## 3.4.3.1 Changement du nombre de points de collocation

Comme expliqué à la section 1.3.4.2, le code Aménophis est pourvu d'une méthode de raffinement de grille. Elle permet de changer le nombre de points de collocation de la grille au cours d'une simulation. On démarre avec peu de points, et leur nombre est augmenté à mesure que la turbulence se développe, sur une épaisseur de plus en plus grande. L'outil de raffinement permet de modifier le nombre de modes de Fourier ou de Chebyshev, d'augmenter le nombre de sous-domaines et de changer le nombre de processus MPI.

Pour augmenter le nombre de modes de Fourier ou de Chebyshev, les spectres de Fourier ou de Chebyshev sont complétés par des zéros. Les variables physiques sont ensuite reconstruites dans l'espace physique. Pour ajouter un sous-domaine, on coupe un sous-domaine existant en deux sous-domaines comprenant chacun le même nombre de points de collocation que le sous-domaine de départ. Chacun des deux domaines « fils » a une distribution de points Gauss-Lobatto. Pour chaque mode de Fourier, le spectre de Chebyshev sert à construire le polynôme d'interpolation de Lagrange. Ce polynôme est ensuite utilisé pour interpoler les variables sur les  $(N_z + 1) + (N_z + 1) - 1 = 2N_z + 1$  points de collocation. Une simulation passe par sessions de 24h sur le supercalculateur, chaque session se termine par l'écriture d'un fichier de sauvegarde qui sert à la reprise du calcul. Les changements de résolution sont effectués sur ce fichier. Ils sont décidés à partir du spectre unidimensionnel suivant

$$\Phi_{1D}^{(m)}(K) = \max_{K=k_x+k_y+n} \left| \widetilde{\Phi}^{(m)}(k_x, k_y, n) \right| \quad \text{pour} \quad m = 1, \dots, M$$
  
et  $-N_{x,y}/2 \le k_{x,y} \le N_{x,y}/2 - 1, \quad 0 \le n \le N_z,$  (3.88)

où  $\tilde{\Phi}^{(m)}$  est la transformée de Fourier de la fonction test  $\Phi^{(m)}$ . Si, pour un nombre d'onde particulier  $K_{\star}$ , on a

$$\Phi_{1D}(K_{\star}) \ge \varepsilon_{1D},\tag{3.89}$$

où  $\varepsilon_{1D}$  est une tolérance donnée, alors on peut décider de réaliser un raffinement manuel de grille dans les directions Fourier ou Chebyshev. On peut aussi couper un sous-domaine. En moyenne, ces changements de résolution sont effectués de 3 à 5 fois par simulation. La figure



FIGURE 3.4 – Erreur  $E_A(t) = \overline{|\partial_i(\rho^{(0)}u_i)|}^{xyz}$  (3.84) pour la simulation 3D anélastique multimode notée AM2. Ses paramètres physiques sont At = 0.10, Sr = 0.4,  $Re = 3 \times 10^4$ , Sc = 0.7, Pr = 0.7 et les coefficients adiabatiques des deux fluides sont égaux à 5/3. Les flèches grises désignent les moments où les adaptations de grille sont automatiquement réalisées par l'algorithme. La chute de la quantité  $E_A(t)$  à t = 12.27 correspond à une augmentation du nombre de points de collocation. Avant cet instant la grille est  $[N_x, N_y, N_d \times (N_z+1)] = [600, 600, (16 \times 48)]$ , et après la résolution devient [816, 816, (20 × 48)].

3.4 illustre comment les modifications de grille (mouvements automatiques des interfaces et raffinement manuel) affectent la précision des simulations. Les flèches grises montrent le déclenchement de l'algorithme d'adaptation de grille de points de collocation. Les interfaces se déplacent suivant le critère (3.46). À chaque fois, on observe une petite baisse de l'erreur  $E_A(t)$ définie en (3.84), c'est-à-dire une amélioration de la précision. Plusieurs centaines d'adaptations surviennent pendant une simulation. Quant à la quantité de points nécessaires, elle augmente lors de la sortie de la phase linéaire de l'instabilité. Les bulles, aiguilles et ensuite la couche de mélange nécessitent davantage de points. Dans l'exemple de la figure 3.4, on a ajouté environ 35% de modes de Fourier dans chaque direction horizontale et 25% de modes Chebyshev, à l'instant t = 12.27 et suivant le critère (3.89). À cet instant, la quantité  $E_A(t)$ qui était en augmentation légère, chute d'un facteur 10 et se stabilise autour de  $10^{-11}$ .

Quant au changement du nombre de processus MPI, il est obtenu en réorganisant le fichier de sauvegarde-reprise.

# 3.4.3.2 Optimisation du critère d'auto-adaptation

Le fonctionnement de l'auto-adaptation du maillage est décrit à la section 3.1.2. Les simulations 3D anélastiques et Boussinesq ont révélé deux problèmes qui ont poussé à améliorer cet algorithme. Le premier est un suivi médiocre de la frontière de la couche de mélange (côté bulles et côté aiguilles) lorsque celle-ci est irrégulière. La présence d'une forte stratification induit un effet de régularisation des frontières, les fronts des bulles et aiguilles sont localisés dans le même plan à tout instant. Dans les simulations anélastiques où la stratification est faible et a fortiori dans les simulations Boussinesq, les fronts des structures sont localisés à des altitudes z différentes. Ce problème ne se présente donc habituellement pas dans les simulations compressibles, la stratification des simulations réalisées étant très élevée.

Le deuxième problème concerne l'intérieur de la couche de mélange. La taille des plus petits tourbillons est la plus faible dans le plan z = 0, et elle augmente quand on s'écarte de ce plan. La densité de points de collocation doit être la plus forte près du plan z = 0, ce qui n'était pas toujours le cas avec la première version de la fonction test. Ce problème est également moins présent dans les simulations compressibles en raison de la saturation de la croissance de la couche de mélange : la turbulence est modérément intense et la taille des plus petits tourbillons varie moins que dans les couches de mélange en approximation de Boussinesq.

Une première idée pour écrire la fonction test est de considérer la somme de quelques grandeurs de base, normalisées par leur maximum spatial. La fonctionnelle, dont les valeurs servent directement au positionnement des interfaces, est basée sur les dérivées première et seconde de la fonction test. La version historique de la fonction test à un instant t est basée sur la concentration, la masse volumique et la température :

$$\Phi(z,t) = \operatorname{Moy}_{x_i,y_j} \left[ \frac{c(x_i, y_j, z_k, t)}{\operatorname{Max}_{x_i, y_j, z_k}(c)} + \frac{\rho(x_i, y_j, z_k, t)}{\operatorname{Max}_{x_i, y_j, z_k}(\rho)} + \frac{T(x_i, y_j, z_k, t)}{\operatorname{Max}_{x_i, y_j, z_k}(T)} \right].$$
(3.90)

Le premier problème provient de l'opérateur de moyenne horizontale  $(x_i, y_j)$  et est illustré en figure 3.5. Les fronts des bulles les plus avancées sont localisés dans la zone de faible densité de points. Des forts gradients de concentration et de masse volumique étant présents à ces fronts, il est nécessaire d'avoir une forte densité de points dans ces zones. La première idée pour résoudre ce problème est de considérer le maximum horizontal au lieu de la moyenne dans l'équation (3.90). Cependant, la fonctionnelle est obtenue par dérivation de la fonction test et la fonction de z obtenue par l'opérateur  $\max_{xi,y_j}$  n'est pas dérivable. On utilise donc plutôt l'astuce suivante. On définit l'opérateur de moyenne Foncmax<sup>(p)</sup> à l'ordre p

$$f_{(p)}(z_k,t) = \text{Foncmax}^{(p)} f(x_i, y_j, z_k, t) = \left[\frac{1}{n_x n_y} \sum_{i=1}^{n_x} \sum_{j=1}^{n_y} f^p(x_i, y_j, z_k, t)\right]^{\frac{1}{p}}.$$
 (3.91)



FIGURE 3.5 – Schéma de la position de l'interface à la frontière supérieure de la couche de mélange. Les bulles 2 et 4 sont mal capturées par la grille lorsque l'interface est positionnée par moyenne  $(x_i, y_i)$  de la fonction test.

On constate que des valeurs de p assez élevées (p = 10) sont nécessaires pour capturer convenablement les bulles les plus avancées. Et une première modification de la fonction test fournit l'expression suivante

$$\Phi(z_k, t) = \text{Foncmax}^{(p)} \left[ \frac{c(x_i, y_j, z_k, t)}{\text{Max}_{x_i, y_j, z_k}(c)} + \frac{\rho(x_i, y_j, z_k, t)}{\text{Max}_{x_i, y_j, z_k}(\rho)} + \frac{T(x_i, y_j, z_k, t)}{\text{Max}_{x_i, y_j, z_k}(T)} \right].$$
 (3.92)

L'utilisation de cette expression résout le premier problème.

Concernant le second problème, il s'agit d'un équilibrage de densité de points de collocation entre trois zones. La première est la frontière de la couche de mélange, qui nécessite un nombre de points importants en raison des forts gradients de concentration et de masse volumique. La seconde est la zone périphérique interne de la couche de mélange. L'écoulement y est turbulent, mais moins intensément que dans la troisième zone, qui est le centre de la couche de mélange. Celle-ci nécessite également une grande densité de points. Les formules (3.90) et (3.92) ne fournissent pas une répartition adéquate des points. Evoquons les profils z de concentration, masse volumique, composantes de vitesse et température. La concentration est constante en dehors de la couche de mélange et varie presque linéairement dans la couche (surtout vrai en approximation de Boussinesq, un peu moins en anélastique). Le critère d'adaptation s'appuie sur la dérivée qui insiste donc de façon égale sur l'ensemble de la couche de mélange, et pas du tout en dehors. Le profil de masse volumique est identique au profil de concentration en approximation de Boussinesq. En anélastique, les fluides au repos présentent une stratification et le profil de masse volumique dans la couche mélange varie légèrement. Dans l'algorithme d'auto-adaptation, le profil de masse volumique insiste donc de façon à peu près égale sur toute l'épaisseur de la couche de mélange, et aussi en dehors dans le cas anélastique de la stratification. Quant à la température et aux composantes de vitesse, elles ont un comportement similaire. Nulles en dehors de la couche de mélange et des variations d'autant plus fortes dans la couche de mélange qu'on se rapproche du plan z = 0. Ainsi, ajouter la vitesse au critère (3.92) permet de concentrer davantage de points de collocation au centre de la couche de mélange. Autre exemple, diminuer l'influence de la masse volumique en multipliant par un coefficient plus petit que 1 permet de placer moins de points pour capter la stratification.

Il convient de trouver un bon équilibre entre ces grandeurs. Guidé par les raisonnements précédents, on ajuste les contributions de chaque grandeur de la fonction test, et le niveau de précision atteint par les simulations guide les réglages. On a convergé vers la fonction test définie par

$$\Phi(z_{k},t) = 2 \operatorname{Foncmax}^{(10)} \left( \frac{c(x_{i}, y_{j}, z_{k}, t)}{\operatorname{Max}_{x_{i}, y_{j}, z_{k}}(c)} + \frac{\rho(x_{i}, y_{j}, z_{k}, t)}{\operatorname{Max}_{x_{i}, y_{j}, z_{k}}(\rho)} + \frac{T(x_{i}, y_{j}, z_{k}, t)}{\operatorname{Max}_{x_{i}, y_{j}, z_{k}}(T)} \right) + \operatorname{Foncmax}^{(10)} \frac{u_{x}(x_{i}, y_{j}, z_{k}, t)}{\operatorname{Max}_{x_{i}, y_{j}, z_{k}}(u_{x})} + \operatorname{Foncmax}^{(10)} \frac{u_{y}(x_{i}, y_{j}, z_{k}, t)}{\operatorname{Max}_{x_{i}, y_{j}, z_{k}}(u_{y})}$$
(3.93)  
+ \operatorname{Foncmax}^{(10)} \frac{u\_{z}(x\_{i}, y\_{j}, z\_{k}, t)}{\operatorname{Max}\_{x\_{i}, y\_{i}, z\_{k}}(u\_{z})}.

L'ajout de la vitesse permet d'obtenir suffisamment de points au centre. Conjugué au Foncmax<sup>(10)</sup> pour les frontières, on améliore la répartition des points. On évite des arrêts de simulations ayant pour cause apparente un manque de résolution et pour cause réelle une mauvaise distribution de celle-ci.

# 3.4.3.3 Exemples de mouvements d'interfaces pendant une simulation

On s'intéresse à une simulation 3D multimode anélastique notée AM1. Ses paramètres physiques sont At = 0.25, Sr = 2,  $Re = 10^4$ , Sc = 0.7, Pr = 0.7 et les coefficients adiabatiques des deux fluides sont égaux à 5/3. La simulation est démarrée avec 8 sous-domaines de 32 points de collocation Chebyshev, et  $256^2$  modes de Fourier. La grille est raffinée à t = 3 et devient  $(8 \times 48) \times 384^2$ , puis  $(10 \times 48) \times 384^2$  à t = 4.47 et finalement  $(12 \times 48) \times 600^2$  à t = 5.54. Le calcul est arrêté à t = 9.3, après que la couche de mélange touche le sommet de la boîte de simulation. La figure 3.6 (gauche) montre l'évolution des interfaces entre sous-domaines en fonction du temps. Lors de la phase linéaire, toutes les interfaces sauf une sont concentrées autour du plan z = 0 pour capturer la croissance des perturbations. La dernière interface est positionnée dans le fluide lourd pour capturer la stratification. Aux instants t = 4.47et t = 5.54, deux sous-domaines sont ajoutés pour suivre la complexité de l'écoulement. La couche de mélange étant de plus en plus large, augmenter le nombre de sous-domaines permet de maintenir la densité de points de collocation. Sur la toute fin du calcul, l'interface supérieure se rapproche fortement de la paroi supérieure de la boîte pour suivre les bulles qui s'en approchent. Le graphe de droite de la figure 3.6 présente l'évolution de la fonctionnelle en fonction du temps. À mesure que la couche de mélange se développe, les gradients de masse volumique et de concentration deviennent moins raides. Cela induit une diminution de la fonctionnelle. Sur la fin de la simulation, les interactions avec la paroi supérieure de la boîte provoque une légère remontée de la fonctionnelle.

# 3.5 Tests élémentaires, grille optimale

On s'intéresse dans cette partie à des tests élémentaires sur la méthode numérique.



FIGURE 3.6 – Simulation AM1. Gauche : évolution de la position des interfaces en fonction du temps. Les augmentations du nombre de sous-domaines à t = 4.47 et t = 5.54 sont visibles et indiquées par les lignes pointillées verticales. Droite : norme de la fonctionnelle utilisée dans l'algorithme d'auto-adaptation. On rappelle que cette norme se comporte comme une borne supérieure pour les erreurs de projections. La norme diminue à mesure que les gradients de concentration et de masse volumique diminuent. À partir de  $t \approx 7.5$ , la couche de mélange remplit toute la boîte de simulation et la norme oscille à des faibles valeurs.

# 3.5.1 Dérivée et intégration Chebyshev

Considérons la fonction suivante :

$$f(z) = \operatorname{erf}(\frac{z}{\delta}), \tag{3.94}$$

dont la représentation graphique est une marche dont la raideur est paramétrée par le réel  $\delta$ . L'expression analytique exacte de sa dérivée est :

$$f'(z)_{ex} = \frac{2}{\delta\sqrt{\pi}} \exp(-\frac{z^2}{\delta^2})).$$
 (3.95)

On utilise le code Aménophis pour effectuer numériquement cette dérivation sur un domaine Chebyshev, au moyen d'un produit matriciel avec la matrice D. Notons  $f'_{Am}$  la dérivée. On évalue l'erreur numérique

$$E_{rr} = \max_{z_k} | f'_{Am}(z_k) - f'(z_k)_{ex} |.$$
(3.96)

Dans le même temps, on souhaite évaluer la précision de la matrice d'intégration calculée en Annexe A, dans le cadre de la résolution directe de l'équation portant sur la pression à k = 0 (voir section 3.1.1.6). L'équation à intégrer est de la forme :

$$\left[\frac{d}{dz} - h(z)\right]p = S(z), \qquad (3.97)$$

où les fonctions f et S sont approchées par les profils raides suivants

$$h(z) = \frac{1}{2} \left( 1 + \operatorname{erf}(\frac{z}{\delta}) \right),$$
 (3.98)

et:

$$S(z) = \frac{1}{2} \left[ 1 + \operatorname{erf}(\frac{z}{\delta}) \right] e^{-20z} - \frac{1}{2} \left[ 1 - \operatorname{erf}(\frac{z}{\delta}) \right] e^{20z}.$$
 (3.99)

La résolution numérique est faite en plusieurs étapes, on compte deux utilisations de la matrice de primitivation. L'erreur numérique est évaluée par application de l'opérateur :

$$E_{rr} = \max_{z} |\left(\frac{d}{dz} - h(z)\right) p(z) - S(z)|.$$
(3.100)

La principale difficulté numérique dans les deux cas est en z = 0, on ne s'intéresse donc qu'au domaine qui comprend cette valeur, les essais ayant été menés sur un calcul à quatre domaines. Le troisième domaine est délimité par l'intervalle  $z \in [-0.0114; +0.0884]$ . Il comprend 64 points qui sont répartis suivant une configuration Gauss-Lobatto. Le paramètre de raideur  $\delta$  varie de  $10^{-4}$  à  $6 \times 10^{-2}$ . La courbe résultat est visible en figure 3.7. Pour un gradient



FIGURE 3.7 – Erreurs d'intégration de l'équation de pression |K| = 0 et de dérivation.

faible, la précision est bonne et l'erreur est proche de  $10^{-11}$  pour la dérivation et  $10^{-14}$  pour l'intégration. Lorsque le paramètre de raideur diminue et approche  $\delta = 10^{-2}$ , l'erreur augmente brutalement. Dans les simulations réelles, on commence avec un faible nombre de points de collocation qu'on augmente progressivement après la transition à la turbulence. On s'assurera d'avoir suffisamment de points pour capter le gradient très localisé de l'état initial de l'instabilité de Rayleigh-Taylor.

# 3.5.2 Dérivation d'une constante et transformation de coordonnées

La dérivée d'une constante est le produit de la matrice de dérivation par le vecteur colonne contenant la dite constante. Supposons que la constante est 1, le vecteur colonne du résultat de la dérivation est alors composé des sommes des coefficients de chaque ligne de la matrice de dérivation D. En théorie, ces sommes sont nulles grâce à une correction de la matrice D (Bayliss *et al.*, 1995). En pratique, elles ne le sont pas en raison d'erreurs d'arrondis.

Une procédure de test du code Aménophis dérive la constante 1 sur chacun des domaines et affiche la moyenne de la valeur absolue des coefficients du vecteur colonne contenant la dérivée. Exprimé autrement, le scalaire  $E_D$  qui évalue l'erreur est :

$$E_D = \frac{0}{N_z} \sum_{i=1}^{N_z+1} |r_i|, \text{ avec } \mathbf{r} = (r_i)_{i \in [0; N_z]} = DC, \qquad (3.101)$$

où D est la matrice de dérivation et C le vecteur colonne composé de 1. Les résultats pour les quatre sous-domaines sont présentés dans le tableau 3.4. On remarque que l'erreur est d'autant plus élevée que le domaine est petit. Dans le cas d'une distribution Gauss-Lobatto des points de collocation, la répartition des points est gouvernée par l'équation (3.17) dans laquelle la limite  $a \to +\infty$  est prise :

$$z_{\infty}(\xi) = \frac{z_{inf} + z_{sup}}{2} + \frac{z_{sup} - z_{inf}}{2}\xi, \quad -1 \leqslant \xi \leqslant 1.$$
(3.102)

Rappelons qu'une fois la matrice de dérivation dans l'espace spectral assemblée, elle su-

	Sous-	Sous-	Sous-	Sous-
	domaine 1	domaine $2$	domaine 3	domaine 4
Erreur $E_D$	$0.632\times 10^{-14}$	$0.130\times 10^{-12}$	$0.128\times 10^{-12}$	$0.749 \times 10^{-14}$
Taille : $z_{sup} - z_{inf}$	1.2036	0.085	0.0998	1.1116
$E_D  imes rac{z_{sup} - z_{inf}}{2}$	$0.380\times10^{-14}$	$0.551\times 10^{-14}$	$0.641\times 10^{-14}$	$0.416\times10^{-14}$

TABLE 3.4 – Précision de la dérivée d'une constante

bit une première correction déjà évoquée (Bayliss et al., 1995) et une modification liée à la transformation de coordonnées. On peut écrire

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial \xi}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \xi},\tag{3.103}$$

d'où

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{2}{z_{sup} - z_{inf}} \frac{\partial}{\partial \xi}.$$
(3.104)

Ainsi, l'erreur de dérivation sur la variable  $\xi$  est amplifiée par la taille du domaine. La dernière ligne du tableau 3.4 montre le produit de l'erreur  $E_D$  mesurée dans le code par le facteur  $\frac{z_{sup}-z_{inf}}{2}$ . On retrouve une erreur quasi-constante et conforme à la littérature.

Les erreurs d'arrondis lors de la dérivation matricielle étant amplifiées par la petitesse des sous-domaines, on prend soin de leur imposer une taille minimale.

### 3.5.3 Convergence exponentielle

Un résultat classique des méthodes spectrales est la décroissance exponentielle de l'erreur de discrétisation avec le nombre de modes. On souhaite mettre en évidence ce résultat. On considère un ensemble de huit simulations 2D anélastiques dont les caractéristiques sont réunies dans le tableau 3.5. Le domaine des simulations est un carré 2D ( $L_y = L_z \equiv 1$ ) comprenant un unique domaine discrétisé par une grille Gauss-Lobatto. L'initialisation en vitesse



FIGURE 3.8 – Gauche : évolution de  $\operatorname{Max}_{y_j,z_k} \partial_i(\rho^{(0)}u_i)$  par rapport au temps pour les huit simulations. L'unique paramètre qui varie est le nombre de points de collocation  $N_z + 1$ . Droite :  $\operatorname{Max}_{y_j,z_k} \partial_i(\rho^{(0)}u_i)$  en fonction de  $N_z + 1$  aux instants t = 1 et t = 3. Les lignes grises représentent une décroissance exponentielle.

	Grille					
Modèle	$M \times (N_z + 1)$	Interfaces	At	Sr	Re	Sc
	$\times N_x \times N_y$					
Anélastique	$(1 \times 32 \rightarrow 512) \times 1024$	Fixées	0.2	1	$10^{5}$	0.7

TABLE 3.5 – Caractéristiques des simulations numériques réalisées pour observer la convergence de grille. Le nombre de modes Chebyshev est le seul paramètre variable. Les coefficients adiabatiques sont  $\gamma_H = \gamma_L = 5/3$  et le nombre de Prandtl Pr = 0.7. Notons que ces deux valeurs seront conservées pour toutes les simulations anélastiques évoquées dans la suite de ce chapitre.

est localisée autour du plan z = 0 et est de type multimode. Le régime linéaire se termine environ à l'instant t = 2.5. Les structures en forme de champignons se développent à partir de t = 4. Le nombre de modes Chebyshev varie entre 32 et 512. Le nombre de modes de Fourier est suffisamment élevé ( $N_y = 1024$ ) pour assurer que les erreurs numériques proviennent de la direction Chebyshev. L'indicateur de l'erreur induite par une résolution insuffisante est basé sur l'équation de contrainte anélastique, il s'agit du maximum de la divergence de la quantité de mouvement (3.86) qu'on écrit  $\operatorname{Max}_{y_j, z_k} \partial_i(\rho^{(0)}u_i)$ , critère plus sévère que celui basé sur la moyenne définie en équation (3.84).

Le graphe de gauche de la figure 3.8 montre l'effet de l'accroissement du nombre de modes Chebyshev sur la précision de la simulation numérique. Le cas  $N_z + 1 = 512$  montre une saturation du maximum de la divergence de la quantité de mouvement autour de  $10^{-13}$ . Précisons que le critère basé sur la moyenne de la valeur absolue de la divergence de la quantité de mouvement sature à une valeur plus faible, proche de la précision machine ( $0.22204 \times 10^{-15}$ ). Le graphe de droite de la figure 3.8, tracé en coordonnées semi-logarithmiques, présente les valeurs de  $Max_{y_i,z_k}\partial_i(\rho^{(0)}u_i)$  aux instants t = 1 et t = 3, en fonction du nombre  $N_z + 1$  de modes Chebyshev. On distingue nettement une convergence exponentielle. Étant donné que la solution à t = 1 est plus raide qu'à t = 3, la convergence est plus lente.

# 3.5.4 Convergence temporelle

La convergence temporelle est étudiée au moyen de la concentration moyenne  $\bar{c}^{xyz}$  calculée à la précision spectrale. L'intégration dans la direction de Chebyshev est réalisée avec la formule de quadrature Clenshaw-Curtis (Peyret, 2002), et la moyenne horizontale est obtenue par une transformée de Fourier. Deux simulations ont été définies (voir tableau 3.6) et ont été lancées cinq fois chacune, pour cinq valeurs de pas de temps. Les pas de temps considérés

		Grille					
Nom	Modèle	$M \times (N_z + 1)$	Interfaces	At	Sr	Re	Sc
		$\times N_x \times N_y$					
AL	Anélastique	$(8 \times 48) \times 1536$	Mobiles	0.1	1	$10^{6}$	$10^{3}$
AT	Anélastique	$(6 \times 48) \times 128$	Mobiles	0.1	1	$10^{3}$	0.7

TABLE 3.6 – Caractéristiques des simulations numériques réalisées pour observer la convergence temporelle.

pour la simulation AL s'écrivent  $\Delta t_n = \Delta t/n$ , où  $\Delta t = 10^{-3}$ , avec n = 1, 2, 4, 8, 16. La simulation AT est un calcul 1D de diffusion pure, sans vitesse, avec un gradient peu raide et Sc = 0.7,  $Re = 10^3$ . Les pas de temps pour cette simulation sont  $\Delta t_n = \Delta t/n$ , où  $\Delta t = 10^{-3}$ , avec n = 1/2, 1, 2, 4, 8. La simulation AL joue également un rôle dans la validation du code Aménophis effectué au chapitre 4. Les erreurs temporelles sont définies de la façon suivante



FIGURE 3.9 – Erreurs numériques définies par l'équation (3.105) pour la valeur moyenne de la concentration  $\overline{c}^{xyz}$ , en fonction du pas de temps. Les échelles sont logarithmiques. Les pentes des droites les plus proches sont 1.33 pour la simulation AL et 1.43 pour la solution AT.

$$E_{AL,n}^2 = \frac{1}{N} \sum_{t} [\bar{c}_n^{xyz}(t) - \bar{c}_{16}^{xyz}(t)]^2 \quad \text{pour} \quad n = 1, 2, 4, 8,$$

 $\operatorname{et}$ 

$$E_{AT,n}^2 = \frac{1}{N} \sum_{t} [\bar{c}_n^{xyz}(t) - \bar{c}_8^{xyz}(t)]^2 \quad \text{pour} \quad n = 1/2, 1, 2, 4, 2, 4$$

où N est le nombre d'échantillons temporels. L'erreur pour les deux simulations est tracée en figure 3.9 en fonction du pas de temps et en échelles logarithmiques. Un ajustement linéaire donne la valeur des pentes, à savoir 1.33 pour la simulation raide AL et 1.43 pour la solution de diffusion AT. Ces exposants sont plus petits que 2, l'ordre théorique du schéma Runge-Kutta. Ils sont cependant sensiblement plus grands que 1. Plusieurs facteurs peuvent expliquer ce résultat. Premièrement, on ne dispose pas de la solution exacte, seulement d'une solution de référence, calculée avec le pas de temps le plus faible. De plus, les erreurs numériques sont le plus souvent dominées par les erreurs spatiales. C'est le cas ici, en particulier pour la simulation raide AL. En outre, le premier cycle en temps est résolu avec un schéma temporel d'ordre 1, et des erreurs de cet ordre peuvent se propager aux cycles suivants. Enfin, les procédures itératives fonctionnent jusqu'à ce que le résidu atteigne  $10^{-12}$ : un pas de temps plus faible conduit à un nombre d'itérations plus faible. Cela empêche les calculs de profiter pleinement des diminutions du pas de temps.

# 3.5.5 Découpage optimal en sous-domaines

	Grille		Parallélisation				
Cas	$M \times (N_z + 1)$	Interfaces	$N_{cores} = M \times$	At	Sr	Re	Sc
	$ imes N_y$		$N_{MPI/d}  imes N_{OMP/MPI}$				
SD1	$(1 \times 512) \times 1024$	Fixes	$128 = 1 \times 128 \times 1$	0.1	1	$10^{5}$	0.7
SD2	$(2 \times 256) \times 1024$	"	$128 = 2 \times 64 \times 1$	"	"	"	"
SD3	$(4 \times 128) \times 1024$	"	$128 = 4 \times 32 \times 1$	"	"	"	"
SD4	$(4 \times 128) \times 1024$	"	$128 = 4 \times 32 \times 1$	"	"	"	"
SD5	$(4 \times 128) \times 1024$	Mobiles	$128 = 4 \times 32 \times 1$	"	"	"	"
SD6	$(8 \times 64) \times 1024$	"	$128 = 8 \times 16 \times 1$	"	"	"	"

On considère ici un jeu de six simulations anélastiques en deux dimensions, dont les caractéristiques sont compilées dans le tableau 3.7. Les six simulations partagent un nombre

TABLE 3.7 – Simulations numériques anélastiques réalisées pour étudier l'influence du nombre de sous-domaines et de la méthode auto-adaptative sur la précision numérique. Comme précédemment on a  $\gamma_H = \gamma_L = 5/3$  et Pr = 0.7. Le nombre total de points de collocation est identique dans ces six simulations. Les simulations à interfaces fixes possèdent une distribution Gauss-Lobatto dans chaque sous-domaine. Les caractéristiques générales de la parallélisation du code sont présentées à la section 3.6.

total identique de points de collocation. Le but est d'étudier l'incidence du nombre de sous-domaines sur la précision, ainsi que d'observer le comportement de la méthode autoadaptative. Les simulations SD1 à SD6 considérées se placent dans un domaine 2D rectan-

(3.105)

gulaire  $(L_y = 1; L_z = 2)$  et on utilise la même initialisation multimode que pour l'étude de convergence exponentielle (voir section 3.5.3). Le nombre d'Atwood est cependant différent et la chronométrie l'est aussi. Le régime linéaire se termine approximativement à l'instant t = 3 et les structures en forme de champignon apparaissent à partir de t = 5. Une couche de mélange se forme à t = 8. L'instant final atteint est t = 11.5, à ce moment la couche de mélange s'étend de  $z \approx -0.25$  jusqu'à  $z \approx 0.25$ . Le critère d'erreur, basé sur le maximum



FIGURE 3.10 – Erreur  $E_A^{MAX}$ , équation (3.86), en fonction du temps. Les simulations SD1 à SD6 sont représentées (voir tableau 3.7).

spatial de la divergence de la quantité de mouvement, est tracé pour ces six simulations sur la figure 3.10. Un condensé des résultats est présenté dans le tableau 3.8. Les interfaces sont fixes pour les simulations SD1 à SD4. Les calculs SD3 et SD4 partagent le même nombre de sous-domaines, situés à des positions différentes. Tandis que les interfaces de SD3 sont positionnées en  $z = \pm 0.1$ , les interfaces de SD4 ont été placées plus loin du plan z = 0, en  $z = \pm 0.25$ , dans le but de mieux capturer la couche de mélange aux instants avancés.

Commentons les résultats. La simulation mono-domaine présente une mauvaise précision et s'arrête à moins de la moitié de l'instant final. En effet, la distribution Gauss-Lobatto concentre les points aux frontières, et trop peu de points sont localisés près du plan z = 0. Le cas SD2, à deux domaines, est également assez imprécis. Trop peu de points de collocation sont placés dans la couche de mélange lorsqu'elle se développe. Le cas SD3 possède 2 domaines fixes, dont deux sont de taille réduite et localisés près du plan z = 0. En conséquence, la première moitié du calcul montre une très bonne précision. Cependant, à partir de t = 8 environ, les structures de l'écoulement franchissent les interfaces et entrent dans les très larges sousdomaines [-1; -0.1] et [0.1; 1]. Ceci provoque une forte augmentation des erreurs numériques. Quant au cas SD4, ses interfaces éloignées sont bien placées pour capturer la couche de mélange. Le cas SD4 est le premier à atteindre l'instant final avec succès. Le cas SD5 partage le même découpage en sous-domaines que les cas SD3 et SD4, mais la grille de points de collocation est auto-adaptée. Cette simulation combine les bons comportements des deux cas à interfaces fixes. Les interfaces sont ainsi localisées près du plan z = 0 pendant la première moitié de la simulation, et la précision est aussi bonne que le cas SD3 (en réalité même un peu meilleure). Dans la seconde moitié de la simulation, les interfaces s'éloignent les unes des autres à mesure que les structures de l'écoulement grandissent. En particulier, à partir de t = 8 la couche de mélange est bien capturée. La précision est meilleure que le cas équivalent SD4 à interfaces fixes. On observe que les erreurs de SD4 et SD5 se rejoignent à l'instant final, lorsque la couche de mélange s'étend exactement entre les deux interfaces fixes de SD4, qui ont été positionnées dans cet objectif. Le dernier cas est SD6. La précision atteinte pendant la phase linéaire est acceptable, et limitée par la taille minimum pour un sous-domaine imposée à l'algorithme d'auto-adaptation (voir section 3.5.2). Après l'apparition de la couche de mélange (t > 8), la simulation SD6 atteint une meilleure précision que toutes les autres simulations. Seules trois simulations atteignent l'instant final t = 11.5, deux simulations auto-adaptées et une simulation à grille fixe, pour laquelle on a manuellement placé les interfaces à l'endroit idéal. Le tableau 3.8 permet de tirer les conclusions suivantes :

Cas	Position	$E_A^{MAX}$	Pas en	Temps CPU	Temps CPU par
	des	(eq. (3.86))	temps moyen	par cycle	unité de temps
	interfaces	temps final	$(10^{-4})$	(s)	physique $(10^3 \text{ s})$
SD1	pas d'interf.	-	12.6	20.1	16.0
SD2	0	-	7.19	3.93	5.47
SD3	-0.1;0;0.1	-	3.28	0.938	2.84
SD4	-0.25; 0; 0.25	$9\times 10^{-4}$	4.38	0.914	2.08
SD5	mobile	$2  imes 10^{-4}$	2.28	0.937	4.03
SD6	"	$2  imes 10^{-5}$	3.10	0.595	1.89

TABLE 3.8 – Précision atteinte au temps final et performances informatiques des simulations SD1 à SD6. Chaque simulation a tourné sur 128 cœurs. Les trois premiers cas n'ont pas atteint le temps final, en raison du déclenchement d'un critère d'arrêt sur la divergence de la quantité de mouvement.

- La simulation SD6 qui comprend 8 sous-domaines auto-adaptés améliore la divergence de la quantité de mouvement  $E_A^{MAX}$  d'un facteur 10 par rapport à la simulation SD5, qui s'appuie sur 4 sous-domaines auto-adaptés. Rappelons que les simulations SD1 à SD6 partagent le même nombre total de points de collocation.
- Le temps CPU par cycle en temps diminue nettement lorsque le nombre de points Chebyshev par domaine diminue.
- Le pas de temps moyen des simulations auto-adaptées est plus faible que les simulations à distribution fixe de points. Les interfaces, mobiles, sont continuellement placées le plus près possible les unes des autres pendant la phase de croissance linéaire de l'instabilité. En conséquence, le critère (3.41) impose un pas de temps faible. Les simulations à grille fixe SD3 et SD4 d'une part et la simulation à grille mobile SD5 d'autre part partagent le même temps CPU par cycle, mais le temps CPU de SD5 par unité de temps physique est supérieur, pour ces raisons.
- La simulation SD6 auto-adaptée à 8 domaines combine la meilleure précision au coût de calcul le plus faible.

La relation entre taille de grille et nombre d'opérations en virgule flottante peut être estimée. Doubler le nombre de points de collocation Chebyshev par domaine multiplie le nombre
d'opérations en virgule flottante par 4 pour les parties principales de l'algorithme. Le calcul des opérateurs d'Uzawa nécessite  $(N_z + 1)^3$  opérations en virgule flottante mais cela reste négligeable. D'un autre côté, doubler le nombre de sous-domaines ne fait que doubler le nombre d'opérations en virgule flottante. Ceci explique le faible coût informatique de la simulation à 8 sous-domaines SD6 par rapport aux autres.

Un argument simple permet d'expliquer pourquoi la simulation à 8 sous-domaines montre une meilleure précision que la simulation à 4 sous-domaines. En présence de 3 sous-domaines ou plus, l'algorithme auto-adaptatif place systématiquement une interface à chaque frontière de la couche de mélange. Cela signifie que les premier et dernier sous-domaines sont de taille très grande. Dans ces domaines, les fluides peuvent être considérés au repos, donc les premier et dernier sous-domaines sont d'une utilité limitée. La proportion de sous-domaines dédiés à capturer du fluide au repos est de 50% pour une simulation à 4 sous-domaines, seuls deux d'entre eux étant situés dans la couche de mélange. Pour une simulation à 8 sous-domaines, 75% des sous-domaines sont localisés dans la couche de mélange. Davantage de points de collocation situés là où se trouve l'écoulement turbulent et les petites échelles qui y sont associées impliquent une meilleure précision. En outre, un nombre plus élevé de sous-domaines fournit davantage de degrés de liberté à l'algorithme d'auto-adaptation qui est donc plus efficace. Un nombre trop élevé de sous-domaines peut cependant diminuer la précision. Dans un domaine de taille fixée, la meilleure précision pour la dérivation Chebyshev est atteinte pour  $40 < N_z + 1 < 80$  (Renaud & Gauthier, 1997). En dessous de 40 points, le manque de polynômes détériore la précision. Au-delà de 80, les erreurs numériques (arrondis) s'accumulent et annulent le bénéfice lié à la présence de modes Chebyshev supplémentaires. Un trop grand nombre de sous-domaines implique aussi que leur taille est faible, ce qui amplifie les erreurs numériques (voir section 3.5.2). Enfin, rappelons qu'à travers une interface entre deux sous-domaines, la pression est  $\mathcal{C}^0$ , les composantes de vitesse  $u_1$  et  $u_2$  sont  $\mathcal{C}^1$  et la composante  $u_3 \text{ est } \mathcal{C}^2.$ 

Ces éléments ont mené à adopter la stratégie suivante.

- Pour une petite grille, par exemple pour la phase linéaire de la croissance Rayleigh-Taylor, 30 points de collocation Chebyshev par sous-domaine sont suffisants, avec au moins 8 sous-domaines.
- Lors de la transition à la turbulence, davantage de points de collocation sont requis. On ajoute quelques sous-domaines puis on augmente le nombre de points de collocation par sous-domaine.
- Lorsque le nombre de points de collocation atteint 80, ne plus l'augmenter et ajouter des sous-domaines.

Cette méthode est dictée par des critères de précision et de temps de calcul. Elle ne peut pas systématiquement être appliquée en raison de limitations matérielles. Pour les très gros maillages, il est parfois nécessaire de conserver un nombre de points de collocation autour de 50 pour diminuer l'occupation mémoire du calcul. Cela est compensé par un plus grand nombre de sous-domaines.

#### 3.5.6 Spectres de pression et de vitesse

Pour terminer cette section dédiée à la précision numérique du code, on trace en figure 3.11 quelques spectres Chebyshev des grandeurs pression et vitesse pour une simulation anélastique 3D. Ces spectres sont calculés par moyenne horizontale (x, y) des  $N_x \times N_y$  spectres Chebyshev présents dans chaque sous-domaine. Six grilles différentes ont été utilisées pour cette simu-



FIGURE 3.11 – Spectres Chebyshev de pression (gauche) et de la composante de vitesse  $u_z$ (droite) extraits de la simulation anélastique 3D AM2, définie par At = 0.10, Sr = 0.4,  $Re = 3 \times 10^4$ , Sc = 0.7, Pr = 0.7 et les coefficients adiabatiques des deux fluides sont égaux à 5/3. La grille de points de collocation est définie par  $[N_x, N_y, N_d \times (N_z + 1)] = [600, 600, (12 \times 48)]$ et l'instabilité est en phase de couche de mélange turbulente à cet instant (t = 11.44). Chaque graphe présente 12 spectres, un par sous-domaine.

lation dont les résultats physiques seront largement discutés dans le chapitre 6. En d'autres termes, cinq raffinements manuels de grille ont été réalisés. À l'instant t = 11.44, l'instabilité de Rayleigh-Taylor simulée est dans la phase de couche de mélange. Douze sous-domaines sont présents ainsi que 600 modes de Fourier dans chacune des directions horizontales. Chacun des spectres présente une décroissance exponentielle des coefficients Chebyshev. Une saturation des coefficients d'ordre élevé est observée dans la quasi-totalité des sous-domaines. Le niveau de cette saturation est relié à la précision atteinte par la discrétisation spatiale. Les premier et dernier sous-domaines sont localisés en dehors de la couche de mélange et sont les sous-domaines les plus larges. La densité de points de collocation est faible et la précision n'est pas aussi bonne que celle des sous-domaines voisins. Quant aux sous-domaines centraux, ils capturent la zone de turbulence la plus intense et les échelles spatiales les plus petites : le niveau de saturation des spectres est un peu plus élevé. Pour la vitesse z, les sous-domaines 7 et 8 ne possèdent pas de saturation, cela signifie que la précision dans ces sous-domaines serait sensiblement améliorée avec une augmentation du nombre de modes Chebyshev.

# 3.6 Parallélisation du code Aménophis

La parallélisation du code Aménophis est décrite dans cette section. On aborde aussi les améliorations effectuées sur cette parallélisation. Plus de détails sont fournis dans le rapport de stage qui a précédé ma thèse (Schneider, 2012). Les routines de calcul des opérateurs d'Uzawa ont été transcodées en CUDA pour fonctionner sur cartes graphiques. La taille des tableaux contenant les opérateurs s'est révélée trop importante pour permettre de bonnes performances, les transferts de données annulant le gain obtenu par le calcul sur carte graphique. La version CUDA du calcul des opérateurs d'Uzawa a donc été mise de côté. Dans un deuxième temps, la parallélisation processeur a été étoffée au moyen d'un protocole de parallélisation plus classique.

#### 3.6.1 Préambule : protocoles de programmation parallèle

Expliquons brièvement les deux protocoles de parallélisation pour CPU les plus courants : MPI et OpenMP. Une parallélisation MPI se manifeste sous la forme d'un découpage des tâches qui s'exécutent plus ou moins indépendamment. On les appelle des processus, leur nombre n'est *a priori* pas limité. Chaque processus n'a accès qu'à son espace mémoire dédié et chacun travaille donc sur son jeu de données. Créer plus de processus MPI permet de réquisitionner un plus grand nombre de nœuds du calculateur sur lequel est lancé le calcul. Rappelons que sur un supercalculateur, un nœud est un groupe de processeurs contenant quelques dizaines de cœurs CPU. Les cœurs d'un même nœud communiquent à travers leur carte mère commune tandis que des cœurs appartenant à des nœuds différents communiquent à travers les liens réseau qui relient les cartes mères entre elles. Les processus MPI peuvent s'échanger des informations par un protocole de messages qui a donné son nom à MPI : Message Passing Interface. Il faut minimiser autant que possible ces échanges qui détériorent les performances du calcul. Quand un processus envoie un message, le calcul est brièvement mis en pause.

La parallélisation OpenMP est complémentaire. Les tâches OpenMP sont appelées des « threads », elles ont accès à un espace mémoire commun. Les communications sont donc immédiates et le concept n'a pas grand sens dans ce cas. Il faut cependant prendre garde à ce que deux threads n'écrivent pas deux valeurs différentes d'une même variable au même moment. Le nombre de threads OpenMP est limité par le matériel. En général, on souhaite qu'à un cœur soit associé un unique thread OpenMP. Il est techniquement possible de lancer plusieurs threads OpenMP sur un même cœur mais cela a souvent comme conséquence de détériorer légèrement les performances, pour aucun avantage apparent. Un exemple d'utilisation de l'OpenMP typique serait le cas d'une boucle *for*, par exemple la somme de deux vecteurs. Dans ce cas, chaque thread est chargé de calculer une partie différente du vecteur résultat. Tous les threads ont accès au tableau à une dimension contenant le vecteur somme, mais chacun travaille sur une zone différente. Le protocole MPI est souvent utilisé afin de segmenter



FIGURE 3.12 – Exemple d'utilisation hybride MPI et OpenMP. Le temps d'exécution s'écoule de la gauche vers la droite.

un problème qui occupe trop de mémoire pour tenir en un seul processus sur un seul nœud. C'est un procédé assez lourd comparativement à l'OpenMP. Si on parallélise la somme de deux vecteurs avec le protocole MPI, chaque processus MPI fait sa part de calcul indépendamment, mais à la fin du calcul le processus maître doit récupérer les différentes parties du vecteur résultat car la mémoire n'est pas partagée entre processus MPI. Il y a plus d'échanges qu'en OpenMP ; c'est plus lourd, tant à l'étape de programmation qu'à l'exécution. Le protocole OpenMP est plus simple d'utilisation et plus rapide sur ce cas précis.

Le protocole MPI est utile pour étendre l'utilisation de la machine, tandis que le protocole OpenMP permet un réglage plus fin et plus précis de l'utilisation des cœurs. En résumé, les protocoles MPI et OpenMP sont complémentaires. Reformulons les utilisations de chacun : deux threads OpenMP créés sur un même nœud peuvent travailler sur les mêmes données. Deux threads OpenMP créés sur des nœuds différents par des processus MPI différents ne se voient pas. Deux processus MPI peuvent communiquer, qu'ils soient sur le même nœud ou non, mais les échanges sont bien plus rapides s'ils sont sur le même nœud. En pratique, une utilisation hybride consiste à éclater les données du calcul avec MPI puis à donner du travail à tous les processeurs disponibles sur les nœuds avec l'OpenMP.

Un exemple d'utilisation hybride MPI et OpenMP est donné sur la figure 3.12. Deux processus MPI sont créés au début du calcul et travaillent sur des données séparées. Les trois étapes les plus lourdes du calcul sont parallélisées en OpenMP de façon ponctuelle.

# 3.6.2 Parallélisation hybride sur trois étages

Historiquement, le code est parallélisé avec deux niveaux de MPI. J'ai ajouté un troisième niveau de parallélisation, programmé avec le protocole OpenMP. Après cet ajout, la parallélisation du code fonctionne de la façon suivante :

- 1. À chaque sous-domaine est dédié un groupe de processus MPI. La majorité des communications entre deux groupes différents de processus MPI survient lors des raccords aux interfaces des différentes quantités physiques.
- 2. À l'intérieur d'un sous-domaine, chaque processus MPI est en charge d'une fraction des  $N_z + 1$  points de collocation Chebyshev. Les dérivées selon les directions horizontales de Fourier sont calculées sans communication, tandis que les dérivées Chebyshev nécessitent d'intenses communications.
- 3. Chaque processus MPI est parallélisé au moyen du protocole OpenMP, ce qui lui permet de calculer sur plusieurs cœurs.

Une question primordiale pour les performances est la suivante. Vaut-il mieux fonctionner avec un grand nombre de processus MPI et peu (ou pas) de threads OpenMP, ou bien avec un nombre réduit de processus MPI parallélisés en OpenMP ? La première solution implique davantage de communications entre processus MPI. Cependant, la totalité de l'algorithme est parallélisé en MPI, alors qu'il n'est que partiellement parallélisé en OpenMP. La répartition doit donc être calibrée pour obtenir de bonnes performances, ce qui est fait à la section 3.6.2.1.

## 3.6.2.1 Résultats des tests de performances

On étudie ici les performances informatiques du code au moyen de plusieurs lancements de la simulation 3D anélastique multimode notée AM1. Ses paramètres physiques sont At = 0.25, Sr = 2,  $Re = 10^4$ , Sc = 0.7, Pr = 0.7 et les coefficients adiabatiques des deux fluides sont égaux à 5/3. Divers temps CPU sont mesurés : temps CPU par cycle, temps CPU par cycle et par point de collocation, temps CPU par cœur, par cycle et par point de collocation. Les résultats sont résumés dans le tableau 3.9. La simulation est démarrée avec une grille comprenant peu de points, elle est raffinée à mesure que la turbulence Rayleigh-Taylor se développe. La configuration de parallélisation est définie par : nombre de cœurs = nombre de sous-

	Grille	Parallélisation	Temps CPU	Temps CPU	Temps CPU
$\operatorname{Cas}$	$M \times (N_z + 1)$	$N_{coeurs} = M$	/ cycle en	par cycle et	par cœur,
	$ imes N_x  imes N_y$	$\times N_{MPI/d}$	(s)	par point	par cycle et
		$\times N_{OpenMP/MPI}$		$(\mu s)$	par point $(ms)$
AM1a	$16.8 \times 10^6 = (8 \times 32) \times 256^2$	$128 = 8 \times 16 \times 1$	13.2	0.789	0.101
AM1b	$56.6 \times 10^6 = (8 \times 48) \times 384^2$	$128 = 8 \times 16 \times 1$	44.2	0.781	0.100
AM1c	$70.8 \times 10^6 = (10 \times 48) \times 384^2$	$160 = 10 \times 16 \times 1$	49.7	0.708	0.112
AM1d	$207 \times 10^6 = (12 \times 48) \times 600^2$	$576 = 12 \times 48 \times 1$	50.9	0.246	0.142
AM1e	$207 \times 10^6 = (12 \times 48) \times 600^2$	$576 = 12 \times 24 \times 2$	61.0	0.294	0.169
AM1f	$207 \times 10^6 = (12 \times 48) \times 600^2$	$288 = 12 \times 24 \times 1$	79.8	0.385	0.111

TABLE 3.9 – Temps de calcul (temps CPU par cycle, temps CPU par cycle et par point de collocation, temps CPU par cœur, par cycle et par point de collocation) pour différentes grilles et différentes configurations parallèles. La parallélisation est définie par : nombre de cœurs = nombre de sous-domaines  $\times$  nombre de processus MPI par sous-domaine  $\times$  nombre de threads OpenMP par processus MPI. La dénomination « cycle »désigne un cycle en temps.

domaines  $\times$  nombre de processus MPI par sous-domaine  $\times$  nombre de threads OpenMP par processus MPI. Comparé au cas AM1a, la grille du cas AM1b est raffinée légèrement dans chaque direction et la configuration de parallélisation est conservée. L'efficacité de calcul, mesurée par le temps CPU par cœur, par cycle et par point de collocation, reste constante. La cas AM1c possède 2 domaines de plus que le cas AM1b, le nombre de CPU mobilisés augmentant de façon proportionnelle. La conclusion est presque la même, on constate qu'une augmentation du nombre de points de collocation de 54 millions à 71 millions n'a qu'un impact faible sur l'efficacité de calcul.

Commentons maintenant les cas AM1d, AM1e et AM1f. Ils partagent la même grille de points de collocation qui a été fortement augmentée comparativement au cas AM1c. La configuration de parallélisation des trois cas AM1d-e-f est différente. Le cas AM1d possède un grand nombre de processus MPI. Les communications, qui augmentent rapidement avec le nombre de processus, détériorent l'efficacité du calcul. Le cas AM1e fonctionne sur le même nombre de CPU que le cas AM1d, mais ils se répartissent différemment. Le cas AM1e utilise l'OpenMP en même temps qu'une réduction du nombre de processus MPI. Les communications MPI sont donc plus rapides, néanmoins l'efficacité de AM1e est moins bonne que AM1d. Cela est probablement dû à deux facteurs. Premièrement, l'algorithme n'est pas totalement parallélisable et parallélisé en OpenMP, alors que c'est le cas en MPI. Deuxièmement, les résultats sur le supercalculateur précédent (nommé TGCC/Titane) sont sensiblement différents. Plus ancien, les communications entre CPU étaient bien plus lentes et l'équilibre optimal entre MPI et OpenMP était de quatre threads par processus MPI. Sur le supercalculateur utilisé pour ces tests (TGCC/Curie), les communications ont fait de grands progrès et il vaut donc mieux utiliser davantage de processus MPI.

Le cas AM1f utilise deux fois moins de cœurs que les cas AM1d et AM1e. Son efficacité est très bonne et rejoint celle obtenue avec les petits cas AM1a, AM1b et AM1c, pour lesquelles l'importance des communications est faible. En raisonnant en temps de calcul total, on trouve qu'augmenter le nombre de processus MPI par un facteur 2 (AM1f  $\rightarrow$  AM1d) diminue le temps de calcul de 36%. Augmenter le nombre de threads OpenMP d'un facteur 2 (AM1f  $\rightarrow$  AM1e) diminue le temps de calcul de 24%. On retrouve la supériorité des deux étages MPI sur l'étage OpenMP, dans le cas du code Aménophis fonctionnant sur le supercalculateur Curie. Effectuer les mêmes tests avec un maillage plus gros (plus d'un milliard de point) augmenterait la part des communications dans le calcul et renverserait probablement la situation.

En conclusion, il vaut mieux privilégier l'utilisation des deux niveaux de MPI sur le niveau d'OpenMP. Cependant, il n'est pas possible de réserver plus de processus MPI par sous-domaine que le nombre de points Chebyshev dans ce sous-domaine. Si le nombre maximum de processus MPI n'est pas suffisant pour contenir la grille en terme de mémoire, alors il faut attribuer plusieurs cœurs à un seul processus MPI. Dans ce cas, seul un cœur calcule tandis que les autres ne font qu'apporter le quota de mémoire qui leur est attaché. Activer le niveau de parallélisation OpenMP dans ces situations permet d'utiliser ces cœurs et d'accélérer le calcul. Cela permet d'éviter de sous-utiliser le supercalculateur.

Dans ce chapitre, on a présenté la méthode numérique utilisée pour résoudre les équations anélastiques. Cette méthode a été améliorée pendant cette thèse, notamment par l'ajout d'une méthode itérative. L'approximation de Boussinesq a également été implantée dans le code Aménophis. Le comportement de la méthode d'auto-adaptation du maillage pour la simulation d'une couche de mélange 3D a été étudié et une fonction test adaptée au problème a été établie. Le premier cycle en temps est résolu par un schéma temporel du premier ordre pour éviter des perturbations temporelles de la pression. Les modes parasites de pression sont analysés et on vérifie qu'ils sont convenablement écartés lors du calcul.

Des tests ont permis de retrouver des propriétés de convergence, et un ensemble de règles pour approcher un découpage optimal en sous-domaines est donné. Enfin, l'ajout d'un étage de parallélisation OpenMP permet d'utiliser à 100% le supercalculateur dans les cas où la charge mémoire est très élevée.

# CHAPITRE 4 Validation du code Aménophis et visualisation d'écoulements Rayleigh-Taylor

# Sommaire

4.1	Validation du code de simulation								
	4.1.1	Comparaison à la théorie linéaire							
	4.1.2	Comparaison à l'expérience monomode de Waddell							
	4.1.3	Bilan des validations							
4.2	Visu	alisation d'écoulements Rayleigh-Taylor							
	4.2.1	Simulation anélastique monomode ANmono							
	4.2.2	Simulation avec modèle de Boussinesq A01-Sr0							
		4.2.2.1 Concentration							
		4.2.2.2 Vorticité							
		4.2.2.3 Critère $Q$							
		4.2.2.4 Champ de vitesse							
		4.2.2.5 Énergie cinétique turbulente							
		4.2.2.6 Nombres de Reynolds basés sur la micro-échelle de Taylor $Re_{\lambda}$ 120							
		4.2.2.7 Dissipation							
	4.2.3	Simulations anélastiques							
		4.2.3.1 Simulation A25-Sr2							
		4.2.3.2 Simulation A01-Sr04							
	4.2.4	Bilan des visualisations							

# 4.1 Validation du code de simulation

De multiples validations de l'option compressible du code Aménophis ont été réalisées dans le passé (Gauthier *et al.*, 2005; Le Creurer & Gauthier, 2008). Les équations en formulation compressible présentent plusieurs différences avec les équations anélastiques et de Boussinesq. En effet, les équations compressibles sont partiellement paraboliques, tandis que les problèmes de Stokes anélastique et de Boussinesq sont elliptiques. Cependant, le socle de la méthode numérique est commun entre les trois modèles physiques et il est donc pertinent de rappeler les validations de l'option compressible du code. La méthode pseudo-spectrale Chebyshev-Fourier-Fourier, comprenant notamment l'algorithme d'auto-adaptation (avant les modifications présentées en section 3.4.3.2) est ainsi utilisée depuis longtemps dans l'option compressible. On présente dans cette section des éléments de validation récents, faisant appel aux modèles anélastique et de Boussinesq. La section 4.1.1 s'intéresse à la croissance linéaire tandis que la section 4.1.2 montre la reproduction d'une expérience de croissance monomode par le code Aménophis.

## 4.1.1 Comparaison à la théorie linéaire



FIGURE 4.1 – Gauche : demi-amplitude de la perturbation en fonction du temps pendant la phase de croissance linéaire pour la simulation AL (points bleus). Les données sont ajustées par la fonction  $h_0 + A \cosh(\sigma_{sim}(t - t_0))$  (ligne rouge). Droite : valeurs du taux de croissance obtenues par : les formules de Duff *et al.* (1962), l'analyse de stabilité linéaire anélastique, et les résultats de simulation (cinq ajustements de courbe).

Le premier élément de validation est constitué de la comparaison du régime de croissance linéaire de l'instabilité de Rayleigh-Taylor en approximation anélastique avec des estimations théoriques. La simulation monomode 2D nommée AL (voir table 3.6) s'appuie sur les paramètres physiques suivants :  $At = 0.10, Re = 10^6, Sc = 10^3, Sr = 1, \gamma_{H,L} = 5/3, Pr = 0.7,$ et le nombre d'onde de la perturbation initiale est  $k = 2\pi$ . Les nombres de Reynolds et de Schmidt sont suffisamment élevés pour minimiser les diffusions de quantité de mouvement et d'espèce. Le paramètre de diffusion qui intervient dans l'équation de concentration est égal à  $10^{-9}$ . La figure 4.1 (gauche) montre la demi-épaisseur h de la perturbation en fonction du temps pour la simulation. Ces données sont ajustées au moyen de la fonction  $h_{th}(t) = h_0 + A \cosh(\sigma_{sim}(t-t_0))$ . Cinq ajustements sont en réalité calculés, sur les intervalles de temps suivants : [0; 5.8], [1; 5.8], [2; 5.8], [3; 5.8] et [4; 5.8]. Le critère classique de validité de la phase linéaire est  $h k \ll 0.1$ . À t = 5.8, on a h k = 0.314 et la croissance linéaire est donc terminée. La ligne rouge correspond au deuxième ajustement, effectué sur l'intervalle de temps [1; 5.8] et tracé en fonction du temps. D'autre part, on dispose de trois estimations du taux de croissance linéaire : deux formules heuristiques établies par Duff et al. (1962) et un calcul en fluide parfait (annexe B). La formule heuristique de Duff et al. (1962) s'écrit de la façon suivante :

$$\sigma_{DHH} = \sqrt{\frac{At\,k}{\psi} + \frac{k^4}{Re^2} - (\frac{1}{Re} + \frac{1}{ScRe})k^2},\tag{4.1}$$

qui prend en compte la viscosité et la diffusion d'espèces, mais pas la stratification des deux fluides. On parle de formule *heuristique* car bien que la formule heuristique (4.1) fournit de bons résultats, la prise en compte d'un nombre de Schmidt fini ne s'appuie pas sur une

	Grille Parallélisation					
Modèle	$M \times (N_z + 1)$	$N_{coeurs} = M \times$	At	Sr	Re	Sc
	$ imes N_x  imes N_y$	$N_{MPI/d}  imes N_{OMP/MPI}$				
Boussinesq	$(16 \times 64) \times 1536$	$128 = 16 \times 8 \times 1$	0.155	0	4970	6797

TABLE  $4.1 - \text{Caractéristiques numériques et physiques de la simulation numérique de valida$ tion, dont le but est de reproduire l'expérience de Waddell*et al.*(2001).

démonstration précise. La première estimation du taux de croissance est pour  $\psi = 1$ , et on obtient  $\sigma_{DHH} = 0.793$ . La dépendance en temps de  $\psi$  est fournie. On la mesure depuis la figure 10 de Duff *et al.* (1962) et pour At = 0.1, on obtient

$$\psi(t) = 1 + 0.833 k \left(\frac{t}{Sc Re}\right)^{1/2},\tag{4.2}$$

qui est tracée sur la partie droite de la figure 4.1, avec des croix rouges. Cela constitue la deuxième estimation du taux de croissance. Visuellement, on ne constate pas de grand écart avec le cas  $\psi = C^{ste}$  tracé avec une ligne bleue. La troisième estimation est fournie par une analyse de stabilité linéaire effectuée sur les équations anélastiques (2.36)-(2.30) et développée en annexe B. Le taux de croissance obtenu est  $\sigma_{th} = 0.7885$  et tient compte de la stratification. Il est également tracé sur la figure 4.1, avec une ligne noire pointillée. Ces trois estimations théoriques donnent des résultats très similaires. Les nombres de Reynolds et de Schmidt étant hauts et le paramètre de stratification faible, la situation est assez proche de la croissance classique Rayleigh-Taylor dont le taux de croissance est  $\sqrt{At k}$ . Il est valide pour des fluides parfaits incompressibles dans une géométrie infinie. Les valeurs des taux de croissance calculées depuis la simulation AL sont tracées avec des points verts sur le graphe de droite de la figure 4.1. Ces valeurs sont en décroissance légère à mesure que l'ajustement insiste de plus en plus sur la fin de la phase de croissance linéaire où les gradients on été amoindris par l'écoulement.

#### 4.1.2 Comparaison à l'expérience monomode de Waddell

Waddell *et al.* (2001) ont réalisé plusieurs études expérimentales d'instabilités de Rayleigh-Taylor (voir section 1.2.4). Des liquides sont utilisés et les nombres d'Atwood sont relativement faibles : At = 0.155 et 0.336. Le modèle de Boussinesq étant valide pour les nombres d'Atwood négligeables devant 1, At = 0.336 est trop élevé pour être correctement représenté par le modèle de Boussinesq. La première expérience est donc celle qui est choisie pour reproduction par simulation avec le code Aménophis, dans le but de valider celui-ci. Étant donné l'absence de stratification, le modèle anélastique ne peut pas être utilisé. L'accélération est 0.74 g et la longueur d'onde des perturbations initiales est  $L_y = 54 mm$ . Cette longueur est utilisée comme longueur de référence pour le calcul des nombres adimensionnels. En effet, dans une expérience monomode, la longueur d'onde se confond avec la largeur du domaine de simulation. La solution de nitrate de sodium est considérée comme saturée, le coefficient de diffusion est donc  $\mathcal{D} = 10^{-9} m^2 s^{-1}$  et la viscosité dynamique est  $\mu = 710^{-3} N s m^{-2}$ . (Hammouch, 2012).

Le tableau 4.1 montre les caractéristiques physiques et numériques de la simulation numérique. Le nombre de Reynolds est modéré ( $Re = 4.97 \, 10^3$ ) tandis que le nombre de Schmidt est très élevé :  $Sc = 6.797 \, 10^3$ . On peut donc s'attendre à conserver pendant toute la simulation une interface très raide entre le fluide lourd c = 1 et le fluide léger c = 0. En conséquence, la grille de points de collocation retenue est très raffinée.



FIGURE 4.2 – Amplitude de la perturbation monomode en fonction du temps pour l'expérience de Waddell *et al.* (2001) (figure 8, points bleus) et pour la simulation numérique (ligne verte).

La figure 4.2 montre l'amplitude de la perturbation en fonction du temps, obtenue par simulation numérique (ligne verte). Elle est en très bon accord avec les données expérimentales représentées en points bleus. Le temps adimensionné de la simulation est noté  $t_{sim}$ , le temps dimensionné (en secondes) qui correspond s'écrit

$$t_{sim}^{dim} = t_{sim} \sqrt{L_y/g} - \delta t, \qquad (4.3)$$

où  $\delta t \approx 0.14 s$  est le décalage en temps entre les chronologies de la simulation et de l'expérience.

Des séquences d'images montrant le développement de l'instabilité sont extraites de Waddell *et al.* (2001) et présentée en figure 4.3, colonne de gauche. Les résultats correspondants obtenus par simulation numérique sont visibles dans la colonne de droite. Étant donné que le nombre d'Atwood est At = 0.155, il y a quelques différences de largeur entre les champignons composés de fluide lourd et ceux composés de fluide léger, plus larges. Cela est bien visible sur la figure (k) de la figure 4.3. Cet effet d'asymétrie apparaît lorsque le nombre d'Atwood n'est pas négligeable devant 1 et est associé à un effet de compressibilité. Le modèle de Boussinesq ne capture donc pas cet effet. En dehors de cette différence, les résultats de l'expérience et de la simulation coïncident très bien.

Pour finir, observons le positionnement et le mouvement des interfaces de la grille de simulation (voir sections 3.1.2 et 3.5.5 pour plus d'informations). La figure 4.4 montre un instantané du champ de concentration sur lequel les interfaces ont été rendues visibles. Les sous-domaines sont concentrés en trois endroits, au front de l'aiguille, aux enroulements entre aiguille et bulle et au sommet de la bulle. Les gradients verticaux étant très raides en ces points, l'algorithme d'auto-adaptation positionne davantage de sous-domaines. Le graphique de droite de la figure 4.4 présente l'évolution temporelle des positions d'interface. Elles s'éloignent les



FIGURE 4.3 – Colonne de gauche : séquence d'images extraites de Waddell *et al.* (2001) (figure 4) montrant la croissance de l'instabilité de Rayleigh-Taylor. Bien que plusieurs champignons soient présents, il s'agit bien d'une croissance monomode jusqu'aux instants les plus avancés où ils commencent à interagir. L'incrément en temps entre chaque image est 0.033 s. Colonne de droite : séquence d'images obtenue par simulation numérique, montrant la croissance de la même instabilité. Chaque image est composée de 2 fois et demie la même image, la simulation ayant été lancée avec un véritable monomode. Cette duplication facilite la comparaison visuelle.

unes des autres pour suivre la croissance de la structure. Notons que la position de l'interface supérieure est assez oscillante jusqu'à  $t \approx 6.7$ . À cet instant, les points (ou les modes) de ce sous-domaine deviennent nécessaires pour capturer la solution et sa position suit de près le front de la bulle.

#### 4.1.3 Bilan des validations

De nombreux éléments de validation ont été effectués pour le code Aménophis. La convergence exponentielle de la méthode spectrale a été vérifiée (section 3.5.3) et la convergence temporelle a été mesurée (figure 3.9). Le taux de décroissance théorique de l'énergie acoustique dans un écoulement au repos a été retrouvé dans une simulation compressible (Le Creurer & Gauthier, 2008), ce qui constitue une bonne illustration du caractère non-dissipatif du



FIGURE 4.4 – Gauche : champ de concentration extrait de la simulation au temps adimensionné t = 5.2. Les traits rouges correspondent à la position des interfaces. Droite : évolution de la position des interfaces en fonction du temps adimensionné.

schéma. Le taux de croissance linéaire monomode d'une simulation anélastique a été comparé à des formules heuristiques avec succès. Le développement d'un champignon Rayleigh-Taylor a été simulé en approximation de Boussinesq et montre un excellent accord avec l'expérience de Waddell *et al.* (2001). Enfin, on verra dans la section 5.2 que le préfacteur  $\alpha_b$  du taux de croissance auto-semblable d'une couche de mélange en approximation de Boussinesq est conforme à la littérature.

La suite de ce chapitre est consacrée à une analyse visuelle des résultats des premières simulations 3D effectuées avec le code Aménophis et les modèles anélastique ou de Boussinesq.

# 4.2 Visualisation d'écoulements Rayleigh-Taylor

On s'intéresse dans cette section à la visualisation d'écoulements Rayleigh-Taylor en approximation anélastique et de Boussinesq. Les résultats présentés ici restent qualitatifs (Schneider & Gauthier, 2015b). Les paramètres physiques et numériques des simulations visualisées sont contenus dans le tableau 4.2.

## 4.2.1 Simulation anélastique monomode ANmono

On s'intéresse en premier à une simulation numérique initialisée avec un unique mode de Fourier. Les champs de masse volumique et de concentration prennent la forme classique des écoulements pilotés par la flottabilité : un champignon. La figure 4.5 (gauche) présente une telle structure sous la forme d'une isosurface de concentration. Pour des raisons de périodicité, on n'aperçoit un champignon complet que d'un seul côté. L'isosurface est orientée avec la gravité vers le haut de façon à bien visualiser cette structure. Le fluide lourd se déplace de bas en haut et le fluide léger dans le sens inverse. Le champignon visible est ce qu'on appelle une aiguille. Le nombre d'Atwood étant faible (At = 0.20), l'asymétrie aiguille-bulle est peu marquée. L'isosurface de concentration est coloriée par la divergence de la vitesse,  $\partial_i u_i$ . Les zones comprimées apparaissent en bleu et les zones dilatées en rouge. On observe que les effets de compressibilité sont forts sous la tête du champignon. L'image de droite de la figure 4.5

Name	Re	At	Sr	$x_{init}$	$\left[k_{min},k_{max}\right]$	$N_z \times N_x \times N_y$
ANmono	$5.10^3$	0.20	0.2	-0.010	$[2\pi,2\pi]$	$(10 \times 64) \times 384^2$
A01-Sr0	$3.10^4$	0.10	0.0	-0.010	[151, 182]	$(24 \times 40) \times 940^2$
A25-Sr2	$3.10^4$	0.25	2.0	-0.010	[151, 182]	$(20 \times 48) \times 600^2$
A01-Sr04	$3.10^4$	0.10	0.4	-0.010	[151, 182]	$(30 \times 48) \times 816^2$

TABLE 4.2 – Définition des simulations. La première colonne contient les noms des simulations. À l'exception de la simulation monomode nommée ANmono, la première partie du nom rappelle le nombre d'Atwood et la deuxième le paramètre de stratification. Si celui-ci est nul, il s'agit d'une simulation Boussinesq, dans le cas contraire d'une simulation anélastique. Les colonnes suivantes donnent le nombre de Reynolds, d'Atwood, le paramètre de stratification, l'amplitude et l'intervalle de nombres d'onde des perturbations initiales, et finalement la grille finale de points de collocation.

montre une isosurface de la composante x de la vorticité, coloriée par son signe. Notons que la composante z de la vorticité est d'intensité bien plus faible que les composantes horizontales. Une isosurface calculée avec la norme de la vorticité (non incluse) se présente sous la forme d'un tore, tandis que la composante horizontale sépare la structure en deux.



FIGURE 4.5 – Simulation AC. Gauche : isosurface de concentration c = 0.5, coloriée par la divergence du champ de vitesse  $\partial_i u_i$ . Droite : isosurfaces de la composante x de vorticité  $\omega_x = \pm 3$  coloriées par leur signe. La gravité est dirigée vers le haut. Les lignes noires horizontales sont les frontières entre les sous-domaines Chebyshev.

La détection des vortex d'un écoulement est une problématique importante étant donné que le champ de vorticité ne correspond pas toujours aux vortex (Jeong & Hussain, 1995; Dubief & Delcayre, 2000). Plusieurs critères ont été proposés, basés sur les minimums de pression, sur la seconde valeur propre du tenseur de vorticité ou sur le critère Q. Ce dernier est lié au second invariant du tenseur des gradients du champ de vitesse  $\nabla_i u_j$ ,  $Q = 1/2 (\Omega_{ij} \Omega_{ij} - S_{ij} S_{ij})$ , où  $\Omega$  et S sont respectivement les parties antisymétrique et symétrique de  $\nabla_i u_j$ . Les valeurs positives de Q correspondent aux vortex, tandis que les valeurs négatives sont associées au cisaillement. La figure 4.6 présente une isosurface de critère Q coloriée par la concentration. Le tore apparaît très clairement au centre du domaine et quatre quarts de ce tore apparaissent dans les coins du domaine horizontalement périodique. Le fluide lourd est situé à l'intérieur du tore et le fluide léger à l'extérieur. Les lignes de courant sont représentées à cet instant sur un quart du domaine de simulation et sont également coloriées par la concentration. Elles mettent en évidence le mouvement du fluide lourd dans le fluide léger.



FIGURE 4.6 – Simulation AC : isosurface basée sur le critère Q, Q = 10. Les lignes de courant sont tracées dans un quart du domaine de simulation. Le tout est colorié par la concentration, le fluide lourd étant associé à la couleur rouge et le fluide léger à la couleur bleue. La gravité est dirigée vers le haut. Les lignes noires horizontales sont les frontières entre les sous-domaines Chebyshev.

#### 4.2.2 Simulation avec modèle de Boussinesq A01-Sr0

Cette section est dédiée à la simulation A01-Sr0 qui fait appel au modèle de Boussinesq. Les champs de concentration et de vorticité, le critère Q, l'énergie cinétique turbulente, les nombres de Reynolds de Taylor locaux et la dissipation sont visualisés. Notons que certains de ces résultats ont déjà été obtenus précédemment (Young *et al.*, 2001; Ristorcelli & Clark, 2004; Vladimirova & Chertkov, 2009).

#### 4.2.2.1 Concentration

Deux isosurfaces de concentration c = 0.02 et c = 0.98 sont représentées sur la figure 4.7. La gravité est dirigée vers le bas sur l'image de gauche et vers le haut sur l'image de droite. Ces deux isosurfaces peuvent être assimilées aux frontières de la couche de mélange, où la turbulence n'est pas pleinement développée. Les structures visibles sont majoritairement de grande taille. Les isosurfaces sont coloriées par la norme de la vorticité, on constate que le sommet des bulles et aiguilles correspond à des minimums de la vorticité. Les deux isosurfaces paraissent similaires, ce qui est cohérent dans le cadre d'une simulation faisant appel au modèle de Boussinesq. En conséquence, on ne présentera pour cette simulation que des vues "de haut" dans la suite, gravité dirigée vers le bas. Notons que la dénomination "vue de haut" ou "vue d'en bas" désignent dans tout ce chapitre les deux directions utilisées sur la figure 4.7.



FIGURE 4.7 – Simulation A01-Sr0 : isosurfaces de concentration c = 0.02 and c = 0.98, coloriées par la norme de la vorticité (échelle logarithmique, bleu  $\omega = 0.04$  et rouge  $\omega = 4$ ). Temps d'arrêt de la simulation A01-Sr0, t = 15.7. Gauche : vue d'en haut (gravité vers le bas). Droite : vue d'en bas (gravité vers le haut).

Le champ de concentration sur le plan z = 0 est représenté sur la figure 4.8. Malgré la présence d'une turbulence développée (voir résultats quantitatifs en section 6.2), d'importantes zones de fluide pur sont présentes. Plus l'altitude est élevée, plus le fluide lourd pur est dominant. La dernière coupe en z = 0.35 est localisée près de la frontière de la couche de mélange. Les champignons, déformés, apparaissent.



FIGURE 4.8 – Simulation A01-Sr0 : coupes (x, y) du champ de concentration aux cotes z = 0 (gauche), z = 0.2 (milieu) et z = 0.35 (droite). Le fluide lourd apparaît en rouge et le fluide léger en bleu. Temps d'arrêt de la simulation A01-Sr0, t = 15.7.

#### 4.2.2.2 Vorticité

La vorticité étant une quantité vectorielle, la norme et chacune des trois composantes peuvent être visualisées. Les composantes horizontales x et y fournissent des résultats quasiidentiques étant donné le caractère homogène de l'écoulement dans ces deux directions. Une isosurface de la composante x de vorticité est affichée sur la figure 4.9 à un temps intermédiaire où la couche de mélange n'est pas totalement développée. Ces images montrent la structure de "cuillère" aperçue sur la simulation monomode (voir figure 4.5). Dans le cas présent, les champignons ont commencé à interagir les uns avec les autres, préfigurant leur déstabilisation et la formation d'une couche de mélange. Les structures sont donc un peu déformées comparativement à la situation du monomode.

La norme de la vorticité est présentée sur la figure 4.10. À gauche, la valeur est basse,  $|\omega| = 3$ , de telle sorte que les grandes structures des frontières de la couche de mélange sont clairement visibles. Pour une valeur plus élevée de la norme de la vorticité (droite, même figure), les structures typiques de l'écoulement Rayleigh-Taylor disparaissent et l'isosurface prend des formes allongées ou fines. Des filaments correspondant à des vortex apparaissent également. À ce niveau de vorticité, on est en présence d'une vorticité moins anisotrope et davantage "universelle". Ces images des structures turbulentes de l'écoulement Rayleigh-Taylor sont qualitativement similaires à d'autres écoulements turbulents. Les grandes structures gardent la mémoire de l'instabilité qui a généré l'instabilité, les échelles intermédiaires sont davantage aléatoires et les petites structures montrent une certaine cohérence (She *et al.*, 1990).

La figure 4.11 compare les composantes x et z du champ de vorticité pour la valeur  $\omega_{x,z} = 10$ . La composante horizontale apparaît plus forte que la composante verticale. Notons qu'à cet instant et pour ces valeurs de vorticité, les structures des frontières (cuillères) ne sont plus visibles.

La figure 4.12 (gauche) montre une coupe de la norme de la vorticité dans un plan vertical (y, z). Quelques structures en forme de champignons sont visibles. La vorticité présente un caractère très hétérogène avec des zones très intenses et d'autres au repos. La frontière de la couche de mélange apparaît très irrégulière, quelques structures de vorticité semblant échappées de la couche. Sur la même figure (milieu) est affichée la coupe sur le plan horizontal z = 0. Le caractère fortement hétérogène de la vorticité est ici aussi bien visible. Le plan



FIGURE 4.9 – Simulation A01-Sr0 : isosurfaces de la composante x de la vorticité  $\omega_x = -5$  (bleu) et  $\omega_x = 5$  (rouge). Temps intermédiaire t = 11, couche de mélange en formation.



FIGURE 4.10 – Simulation A01-Sr0 : isosurface de vorticité, vue de haut (gravité vers le bas). Gauche :  $|\omega| = 3$ . Droite :  $|\omega| = 20$ . Les isosurfaces sont coloriées par le champ de concentration. Temps d'arrêt de la simulation A01-Sr0, t = 15.7.

horizontal éloigné du centre de la couche de mélange (même figure, droite) contient quelques structures liées à la frontière de la couche. Des zones de fluide au repos sont présentes.

Sur la figure 4.13, le champ de vitesse est superposé au champ de vorticité. Un sousensemble du domaine de simulation est extrait et est défini par 0 < x, y < 0.319 et -0.117 < z < 0.133. L'image de gauche est le plan horizontal (x, y) et l'image de droite le plan vertical



FIGURE 4.11 – Simulation A01-Sr0. Gauche : isosurfaces de la composante x de la vorticité  $\omega_x = -10$  et  $\omega_x = 10$ . Droite : isosurfaces de la composante z de la vorticité  $\omega_x = -10$  et  $\omega_x = 10$ . Les valeurs négatives de vorticité sont coloriées en bleu, les valeurs positives en rouge. Temps d'arrêt de la simulation A01-Sr0, t = 15.7.



FIGURE 4.12 – Simulation A01-Sr0 : coupes de la norme de la vorticité. Gauche : plan vertical (y, z). Milieu : plan horizontal z = 0. Droite : plan horizontal z = 0.35. Temps d'arrêt de la simulation A01-Sr0, t = 15.7.

(y, z). Les valeurs positives de vorticité apparaissent en rouge, les valeurs négatives en bleu. L'enroulement du champ de vitesse autour des vortex est visible. Des effets 3D sont également présents, par exemple en bas à droite de l'image de gauche, où le fluide se meut dans la direction de la gravité et perpendiculairement au plan de coupe.



FIGURE 4.13 – Simulation A01-Sr0 : coupes du champ de vorticité. Gauche : plan horizontal (x, y). Droite : plan vertical (y, z). Le champ de vitesse apparaît en traits blancs. Ces coupes sont extraites d'un sous-ensemble du domaine de simulation : 0 < x, y < 0.319 et -0.117 < z < 0.133. Temps d'arrêt de la simulation A01-Sr0, t = 15.7.

## 4.2.2.3 Critère Q

Deux isosurfaces de critère Q sont tracées sur la figure 4.14, pour les valeurs Q = 30 et Q = 50. À gauche, la faible valeur de Q permet de visualiser un grand nombre de vortex. Certains d'entre eux sont proches des frontières de la couche de mélange et sont constitués de fluide pur. Sur la droite, la valeur plus élevée de Q sélectionne les vortex les plus intenses, localisés plus profondément dans la couche de mélange. Ils sont davantage constitués de fluide partiellement mélangé. Cette figure met en évidence la structure intermittente de la vorticité. Celle-ci est quantitativement étudiée à la section 5.4 du chapitre suivant.

#### 4.2.2.4 Champ de vitesse

De gauche à droite, la figure 4.15 présente la norme de la vitesse |u|, une composante horizontale  $u_x$  et la composante verticale  $u_z$ . Le même plan de coupe z = 0 est choisi pour ces trois grandeurs. La norme de la vitesse apparaît très hétérogène comme attendu d'un écoulement turbulent. La vitesse verticale est plus intense que la vitesse horizontale, de larges zones de vitesse  $u_z$  positive ou négative sont visibles et correspondent à des mouvements ascendants ou plongeants.

#### 4.2.2.5 Énergie cinétique turbulente

La figure 4.16 montre l'énergie cinétique turbulente  $k = u'_i u'_i/2$ ,  $0 \le k \le 0.239$ , dans le plan z = 0 et au temps d'arrêt de la simulation A01-Sr0, t = 15.7. On a noté  $u'_i$  la fluctuation de Reynolds de la composante de vitesse  $u_i$ . Les fortes disparités spatiales d'intensité sont une indication du caractère intermittent de l'écoulement.



FIGURE 4.14 – Simulation A01-Sr0 : isosurface de critère Q colorié par la concentration (fluide lourd en rouge, fluide léger en bleu). Gauche : Q = 30. Droite : Q = 50. Temps d'arrêt de la simulation A01-Sr0, t = 15.7.



FIGURE 4.15 – Simulation A01-Sr0 : champ de vitesse sur le plan de coupe horizontal z = 0. De gauche à droite : |u|,  $u_x$ ,  $u_z$ . L'échelle de couleur est 0 (bleu) à 0.22 (rouge) pour la norme de la vitesse, et -0.22 (bleu) à 0.22 (rouge) pour les deux composantes. Temps d'arrêt de la simulation A01-Sr0, t = 15.7.

## 4.2.2.6 Nombres de Reynolds basés sur la micro-échelle de Taylor $Re_{\lambda}$

On écrit les nombres de Reynolds locaux basés sur les micro-échelles de Taylor x ou z sous la forme

$$Re_{\lambda xx}^{3D} = Re \left| \frac{u'_x}{\partial_x u'_x} \right| \sqrt{2k} \quad \text{et} \quad Re_{\lambda zz}^{3D} = Re \left| \frac{u'_z}{\partial_z u'_z} \right| \sqrt{2k}.$$
(4.4)

Il s'agit de quantités 3D, tracées sur le plan de coupe z = 0 (figure 4.17). L'échelle de couleurs, qui est identique pour ces deux nombres de Reynolds, s'étend sur 8 ordres de grandeur. La direction verticale révèle des structures bien plus intenses que la direction horizontale, ce qu'on



FIGURE 4.16 – Simulation A01-Sr0 : énergie cinétique turbulente  $k = u'_i u'_i/2$  sur le plan horizontal z = 0. Échelle de couleur : 0 (bleu)  $\leq k \leq 0.239$  (rouge). Temps d'arrêt de la simulation A01-Sr0, t = 15.7.

avait déjà remarqué pour les champs de vitesse. Le caractère intermittent de l'écoulement est mis en évidence par ces images : les zones bleues correspondent à des zones où le fluide est presque au repos tandis que dans les zones rouges, le nombre de Reynolds atteint  $10^6$ .



FIGURE 4.17 – Simulation A01-Sr0 :  $Re_{\lambda xx}^{3D} = Re \left| \frac{u'_x}{\partial_x u'_x} \right| \sqrt{2k}$  (gauche) et  $Re_{\lambda zz}^{3D} = Re \left| \frac{u'_z}{\partial_z u'_z} \right| \sqrt{2k}$  (droite), tracés sur le plan de coupe z = 0. L'échelle est logarithmique. Temps d'arrêt de la simulation A01-Sr0, t = 15.7.

## 4.2.2.7 Dissipation

La dissipation est définie par  $\varepsilon = \nabla_i u_j \nabla_i u_j$ . Une isosurface de cette quantité est affichée sur la figure 4.18 (gauche). Les structures dissipatives se présentent sous la forme de feuillets, plus nombreux et resserrés à l'intérieur de la couche de mélange qu'aux frontières. L'isosurface est coloriée par l'énergie cinétique turbulente k; on note que les grandes valeurs de dissipation ne s'accompagnent pas toujours de grandes valeurs de k.

Sur la droite, une coupe verticale de la dissipation affiche une forte ressemblance avec la coupe de vorticité de la figure 4.12 (gauche). Cependant, l'isosurface de dissipation ne fait apparaître aucun tube de dissipation. Cela constitue une différence avec la vorticité qui prend la forme de nappes et de vortex. La figure 4.19 (gauche et droite) montre l'influence de l'altitude sur la dissipation. Les plans horizontaux proches de la frontière de la couche de mélange présentent de grandes zones au repos, sans dissipation. La figure 4.19 (gauche) peut être regardée en comparaison avec la figure 4.17 (nombres de Reynolds locaux).



FIGURE 4.18 – Simulation A01-Sr0. Gauche : isosurface de dissipation  $\varepsilon = 250$  coloriée par l'énergie cinétique turbulente k en échelle logarithmique, de  $k = 5 \times 10^{-5}$  (bleu) à  $k = 10^{-2}$ (rouge). Droite : coupe de la dissipation sur un plan vertical (y, z), en échelle logarithmique, de  $\varepsilon = 10$  (bleu) à  $\varepsilon = 1115$  (rouge). Temps d'arrêt de la simulation A01-Sr0, t = 15.7.

#### 4.2.3 Simulations anélastiques

Les résultats de deux simulations anélastiques sont présentés dans cette section. La première, nommée A25-Sr2, a été stoppée alors que la couche de mélange n'est pas totalement établie. La stratification est modérée de même que le nombre d'Atwood. La seconde, nommée A01-Sr04, a une stratification faible et le même nombre d'Atwood que la simulation



FIGURE 4.19 – Simulation A01-Sr0 : coupes horizontales de dissipation sur le plan z = 0 (gauche) et sur le plan z = 0.35 (droite). Échelle logarithmique  $\varepsilon \in [10; 1115]$  (bleu à rouge). Temps d'arrêt de la simulation A01-Sr0, t = 15.7.

Boussinesq A01-Sr0 présentée dans la section précédente. Cette simulation a avancé jusqu'au stade de la couche de mélange développée. Étant donné que le modèle anélastique contient le mode entropique (certes sous une forme rudimentaire), on se concentre sur la température, le nombre de Mach et les fluctuations de pression. Au contraire du modèle de Boussinesq, celle-ci n'a pas qu'un rôle de multiplicateur de Lagrange et participe à l'équation d'état.

#### 4.2.3.1 Simulation A25-Sr2

Commençons par la simulation A25-Sr2, turbulente, dont les structures en forme de champignons sont bien formées, mais qui ne présente pas encore une couche de mélange bien établie. Deux isosurfaces de fluctuations de pression  $p' = \pm 0.004$  sont tracées sur la figure 4.20. On ne distingue pas de structure particulière à l'intérieur de l'écoulement. En revanche, des zones vaguement ellipsoïdales correspondant à des surpressions sont localisées aux frontières. Il s'agit des fronts des champignons.

Les écarts à la situation initiale isotherme  $T^{(initial)}(z) = 1$  sont visibles sur les isosurfaces de température T = 0.97 et T = 1.03 tracées sur la figure 4.21. La forme des champignons apparaît clairement, de même que l'asymétrie de taille entre les bulles et les aiguilles (Mellado *et al.*, 2005; George & Glimm, 2005; Livescu, 2013). Ces dernières se réchauffent en plongeant dans le fluide léger tandis que les bulles se refroidissent. On peut émettre l'hypothèse suivante. En plongeant, le fluide lourd se retrouve entouré de fluide de plus haute pression et se comprime donc légèrement, d'où résulte une élévation de température. Inversement, le fluide léger ascendant est entouré de fluide de plus faible pression que lui et se dilate : il refroidit.

Une isosurface de nombre de Mach est tracée sur la figure 4.22. La vue de côté permet de visualiser la localisation verticale des zones des plus grandes valeurs de nombre de Mach. On constate qu'au stade où en est la simulation A25-Sr2, le plan z = 0 ne contient aucune valeur importante du nombre de Mach. Les effets de compressibilité dynamique sont concentrés dans



FIGURE 4.20 – Simulation A25-Sr2 : isosurfaces de fluctuations de pression p' = -0.004 (bleu) and p' = 0.004 (rouge). Gauche : vue de haut, gravité vers le bas. Droite : vue d'en bas, gravité vers le haut. Temps d'arrêt de la simulation A25-Sr2, t = 9.5.



FIGURE 4.21 – Simulation A25-Sr2 : isosurfaces de température T = 0.97 (bleu) et T = 1.03 (rouge). La température de l'état de repos est T = 1. Gauche : vue de haut, gravité vers le bas. Droite : vue d'en bas, gravité vers le haut. Temps d'arrêt de la simulation A25-Sr2, t = 9.5.

la partie supérieure des bulles et des aiguilles.



FIGURE 4.22 – Isosurface de nombre de Mach Mach = 0.12 coloriée par la concentration. Vue de côté, gravité vers le haut. Temps d'arrêt de la simulation A25-Sr2, t = 9.5.

#### 4.2.3.2 Simulation A01-Sr04

Le nombre d'Atwood de la simulation A01-Sr04 est plus faible que celui de la simulation A25-Sr2, on s'attend donc à des effets de compressibilité plus faibles. Comme dans la section 4.2.3.1, on étudie l'aspect des isosurfaces de fluctuations de pression, de température et de nombre de Mach. L'instant d'arrêt de la simulation est assez avancé et la couche de mélange est ici pleinement formée.



FIGURE 4.23 – Simulation A01-Sr04 : Gauche : isosurface de la norme de la vorticité  $|\omega| = 10$ . Droite : isosurface de critère Q, avec Q = 20. Les deux isosurfaces sont coloriées par la concentration. Vue d'en haut, gravité vers le bas. Temps d'arrêt de la simulation A01-Sr04, t = 15.

Commençons par observer les structures de l'écoulement. La figure 4.23 présente une isosurface de vorticité sur la gauche et une isosurface de critère Q sur la droite. Toutes deux sont coloriées par la concentration. L'asymétrie de la couche de mélange se voit peu sur ces représentations, on se contente donc de la vue d'en haut. À ce stade, on n'observe pas de différence fondamentale avec la simulation Boussinesq A01-Sr0. Quelques grandes structures apparaissent sur les bords de la couche de mélange et son centre est peuplé d'un grand nombre de tourbillons.

Dans un deuxième temps, on s'intéresse à la physique présente dans le modèle anélastique et absente du modèle de Boussinesq. La figure 4.24 montre deux isosurfaces de température T = 0.99 et T = 1.01. Les bulles et les aiguilles sont clairement visibles. Leur différence en taille est également visible bien que plus faible que pour la simulation A25-Sr2 (figure 4.21) du fait du faible nombre d'Atwood. Comme déjà observé, les aiguilles se réchauffent et les bulles se refroidissent. Le nombre d'Atwood n'étant pas très grand, l'écart à la température de l'état de repos ne dépasse pas quelques pourcents (résultats quantitatifs fournis en chapitre 6).

Observons la norme du terme barocline de l'équation de vorticité anélastique (2.94). La figure 4.25 présente une vue d'en haut et une vue de côté d'isosurfaces de cette quantité, coloriées par la concentration. Les structures des frontières de la couche de mélange laissent deviner les champignons (ou les tores, ce qui est équivalent). À l'intérieur, on observe des structures allongées et fines, en forme de feuillets. La concentration est élevée sur la face supérieure de ces structures et faible en dessous. Elles correspondent donc à des frontières



FIGURE 4.24 – Simulation A01-Sr04 : isosurfaces de température T = 0.99 (en bleu) et T = 1.01 (en rouge). Gauche : vue d'en haut, gravité vers le bas. Droite : vue d'en bas, gravité vers le haut. Temps d'arrêt de la simulation A01-Sr04, t = 15.



FIGURE 4.25 – Simulation A01-Sr04 : isosurfaces de la norme euclidienne du terme vectoriel barocline **b** de l'équation de vorticité anélastique (2.94), coloriées par la concentration. Gauche :  $|\mathbf{b}| = 7$ , vue d'en haut, gravité vers le bas. Droite :  $|\mathbf{b}| = 4$ , vue de côté, gravité vers le bas. Temps d'arrêt de la simulation A01-Sr04, t = 15.

géométriques entre fluides très peu mélangés. On peut faire l'hypothèse que le terme barocline diminue à mesure que le mélange devient plus efficace et que les zones de fluides purs sont moins étendues.

Le nombre de Mach est présenté sur la figure 4.26. Il ne présente pas de structure clairement identifiable. Contrairement à la simulation A25-Sr2, le plan z = 0 contient des zones de fort nombre de Mach. Cela est lié à l'état bien développé de la couche de mélange de la simulation A01-Sr04 par rapport à A25-Sr2. Les structures de fort Mach sont constituées de fluide léger dans la partie supérieure du domaine, il s'agit de colonnes de fluide ascendant. De façon symétrique, les zones de fort Mach dans la partie inférieure du domaine sont constituées de fluide lourd plongeant.

Finalement, la température et le nombre de Mach sont tracés sur le plan de coupe z = 0



FIGURE 4.26 – Simulation A01-Sr04 : isosurfaces de nombre de Mach Ma = 0.10, coloriées par la concentration. La vitesse du son est définie par  $c_s^2 = \gamma \frac{p^{(0)}}{\rho^{(0)}}$ . Gauche : vue d'en haut, gravité vers le bas. Droite : vue de côté, gravité vers le bas. Temps d'arrêt de la simulation A01-Sr04, t = 15.



FIGURE 4.27 – Simulation A01-Sr04 : visualisations sur le plan de coupe z = 0. Gauche : température, échelle linéaire 0.97 < T < 1.027. Droite : Nombre de Mach, échelle linéaire  $10^{-3} < Ma < 0.13$ . Temps d'arrêt de la simulation A01-Sr04, t = 15.

(figure 4.27). On constate la faible taille des structures en lien avec la turbulence. Les zones de fortes valeurs de nombre de Mach sont en général associées à des zones d'échauffement ou de refroidissement ( $T \neq 1$ ), bien que des exceptions existent. On distingue de larges zones à très faible compressibilité.

## 4.2.4 Bilan des visualisations

Cette section a permis de dégager ou de retrouver certaines propriétés générales de l'instabilité de Rayleigh-Taylor.

(i) Un écoulement monomode Rayleigh-Taylor génère une structure de vorticité en forme de tore, qui apparaît également en utilisant le critère Q.

*(ii)* Pour une simulation multimode, les structures en forme de champignon et caractéristiques de l'écoulement Rayleigh-Taylor n'apparaissent qu'aux bords de la couche de mélange. Au cœur de celle-ci, les structures de vorticité n'ont pas la forme de tore. En effet, les tourbillons et vortex semblent visuellement avoir une organisation proche d'une turbulence homogène et isotrope.

*(iii)* Le caractère intermittent de l'écoulement est suggéré par le tracé de l'énergie cinétique turbulente et des nombres de Reynolds locaux. On remarque que certaines régions restent au repos, même au cœur de la couche de mélange. Du fluide pur est également présent en quantité non-négligeable.

(iv) La structure des zones dissipatives est en forme de nappe ou de feuillets, et la dissipation est plus intense dans la couche de mélange qu'aux bords.

(v) Les simulations anélastiques montrent l'asymétrie entre les bulles et les aiguilles lorsque le nombre d'Atwood n'est pas négligeable devant 1. Les bulles se dilatent et refroidissent tandis que les aiguilles se contractent et chauffent en plongeant.

(vi) Les valeurs les plus élevées du nombre de Mach sont rencontrées dans les colonnes de fluide léger ascendant ou de fluide lourd plongeant. L'ensemble de la couche de mélange est concerné par ces effets de compressibilité dynamique qui ne sont pas restreints aux grandes structures présentes aux frontières.

# CHAPITRE 5 Résultats de la simulation en approximation de Boussinesq

#### Sommaire

5.1	1 Introduction									
	5.1.1	Préambule : calcul des moyennes								
	5.1.2	Stabilité linéaire								
5.2	Rési	ltats de la simulation : généralités								
5.3	Vite	sse, pression, énergie cinétique et dissipation								
	5.3.1	Vitesse								
	5.3.2	Spectres de flux de masse								
	5.3.3	Dissipation								
<b>5.4</b>	Vort	$\operatorname{cicit}\acute{\mathrm{e}}$								
	5.4.1	Propriétés générales								
	5.4.2	Bilan d'enstrophie								
5.5	Méla	ange								
5.6	Bila	n								

# 5.1 Introduction

Ce chapitre est dédié à l'étude des résultats d'une simulation menée avec le code Aménophis, en approximation de Boussinesq. Comme évoqué au chapitre 1, on note quatre contributions avec le modèle de Boussinesq : Young *et al.* (2001); Ristorcelli & Clark (2004); Vladimirova & Chertkov (2009); Boffetta *et al.* (2010). Le présent travail s'ajoute à ces études (Schneider & Gauthier, 2015*c*).

Young *et al.* (2001) ont effectué des simulations de l'instabilité de Rayleigh-Taylor en deux et trois dimensions d'espace, au moyen d'un code spectral Chebyshev-Fourier-Fourier monodomaine. Il est observé que les différences entre les cas 2D et 3D sont massives. La transition de la phase linéaire vers la couche de mélange est découpée en trois phases. La chute libre suit la phase linéaire, les structures en forme de champignon croissent rapidement. Arrive un moment où ces structures se déstabilisent : c'est la phase de mélange. L'énergie accumulée pendant la phase de chute libre est transférée vers le mélange qui est (temporairement) plus efficace que pendant la troisième phase. Il s'agit de la phase de croissance auto-semblable. La densité de probabilité du scalaire est fournie, et des modèles analytiques de vitesse d'évolution de champignon sont discutés.

Ristorcelli & Clark (2004) analysent en détail le caractère auto-semblable de la croissance de la couche de mélange. En supposant la croissance auto-semblable des moments d'ordre

deux de cette équation, ils établissent une équation différentielle pour la demi-épaisseur h(t). La solution de cette équation donne la loi classique en  $gt^2$ , avec un terme supplémentaire, linéaire en temps, et fonction des conditions initiales. La constante  $\alpha_b$  peut donc être considérée comme dépendant du temps. De plus, il a été montré que sa valeur n'est pas universelle : la présence de grandes longueurs d'onde dans la perturbation initiale cause une augmentation de la constante. L'analyse auto-semblable permet à Ristorcelli & Clark (2004) de déterminer les variations temporelles de la longueur intégrale  $(t^2)$ , de l'échelle de Taylor  $(t^{1/2})$  et de l'échelle de Kolmogorov  $(t^{-1/4})$ . Le régime auto-semblable est donc atypique, en raison de la présence de plusieurs échelles de temps. Notons que l'élargissement du spectre peut aussi être mis en évidence avec un modèle de turbulence (Grégoire, 1997; Souffland *et al.*, 2002). Ristorcelli et Clark constatent que le régime auto-semblable est atteint pour les échelles de turbulence et de mélange après environ trois temps de retournement de tourbillons. Comme Young *et al.* (2001), ils concluent que la couche de mélange complète ne peut pas être auto-semblable en raison du faible nombre de Reynolds des frontières et du mélange, jamais abouti au niveau moléculaire en raison de l'entraînement continu de fluide pur à travers la couche de mélange.

Vladimirova & Chertkov (2009) ont utilisé un code basé sur les éléments spectraux pour effectuer des simulations 3D de couches de mélange Rayleigh-Taylor en approximation de Boussinesq, dans le but de vérifier les résultats de l'approche phénoménologique de Chertkov (2003). La croissance auto-semblable et la question de l'universalité de la turbulence Rayleigh-Taylor sont abordées. L'échelle contenant l'énergie,  $R_0$ , est définie au moyen d'une corrélation à deux points. Avec cette définition,  $R_0$  est proche du maximum du spectre d'énergie cinétique turbulente. Il est observé que  $R_0 \approx 0.05 h(t)$  et que l'échelle intégrale vaut la moitié de la demiépaisseur,  $L = u_z^3/\varepsilon \approx 0.50 h(t)$ . Il y a donc une séparation d'échelles entre L et  $R_0$ . Ces deux échelles ne varient pas en fonction des conditions initiales.

Des simulations numériques effectuées sur un domaine tri-périodique ont permis à Boffetta et al. (2009, 2010) de conforter les résultats de Chertkov (2003). Le scalaire (ici la température) se comporte passivement aux petites échelles. Les coefficients des fonctions de structure de vitesse et de température sont mesurés et sont de valeurs comparables à leurs équivalents en turbulence homogène et isotrope. Il est observé que l'écoulement est isotrope dans la zone inertielle. Cette étude suggère que la turbulence Rayleigh-Taylor et la turbulence homogène et isotrope sont comparables.

La turbulence Rayleigh-Taylor en approximation de Boussinesq représente un état idéal de l'instabilité de Rayleigh-Taylor. Comme évoqué à la section 1.1.2, c'est un état simplifié. La thermodynamique et l'acoustique sont absentes, le terme barocline est dégénéré et nul sur l'axe vertical. Malgré cette simplicité apparente, diverses questions demeurent ouvertes. La convergence vers un état auto-semblable est observée pour les quantités moyennes, mais n'est pas claire pour les moments d'ordres élevés, la vorticité, la dissipation, etc. (Livescu et al., 2010). Est-ce parce que le temps avant convergence est élevé et que les simulations numériques ne vont pas assez loin, ou bien parce que ces quantités ne respectent tout simplement pas la croissance auto-semblable? L'allure du spectre à différentes échelles est aussi un problème ouvert. Le spectre du régime inertiel est vraisemblablement de type Kolmogorov-Obukhov. Le spectre aux grandes échelles est attendu en  $E(k) \sim k^{-7/4}$  par le modèle de Canuto V.M. and Goldman I. (1985), qui fonctionne bien pour les écoulements de Kelvin-Helmholtz et de Rayleigh-Bénard. Les simulations LES de Cook et al. (2004) et DNS de Cabot & Cook (2006) montrent un caractère concave conforme à cette prédiction. Ce n'est pas le cas des autres simulations évoquées ici et au chapitre 1. Le caractère isotrope ou anisotrope de l'écoulement aux petites échelles n'est pas tranché. Cette question est liée aux importances comparées de la flottabilité aux petites échelles et de l'énergie provenant de la cascade de Richardson. Enfin, la transition de mélange (Dimotakis, 2000) est obtenue par LES (Cook *et al.*, 2004; Youngs, 2013) et par DNS en modèle de Sandoval (Cabot & Cook, 2006). Elle n'a pas été atteinte en approximation de Boussinesq.

Depuis l'étude de Orszag & Patterson (1972), la simulation en turbulence homogène et isotrope progresse à chaque génération de supercalculateurs (Celani, 2007; Ishihara *et al.*, 2009). Le nombre de Reynolds basé sur la micro-échelle de Taylor est ainsi passé de 35 à 1200 en une trentaine d'années. Certains comportements de la turbulence ne sont discernables que pour des nombres de Reynolds élevés, de plusieurs centaines (Ishihara *et al.*, 2009). L'effort porté sur la simulation de la turbulence Rayleigh-Taylor en approximation Boussinesq est donc pertinent.

#### 5.1.1 Préambule : calcul des moyennes

On s'attend à ce que la couche de mélange Boussinesq soit homogène dans les deux directions horizontales. Pour analyser les résultats, on utilise donc la moyenne de Reynolds pour laquelle la moyenne d'ensemble est assimilée à la moyenne spatiale suivante :

$$\varphi(x, y, z, t) = \overline{\varphi}(z, t) + \varphi'(x, y, z, t), \qquad (5.1)$$

où  $\overline{\varphi}(z,t) = (L_x L_y)^{-1} \int \varphi(x,y,z,t) \, dx \, dy$ . On a  $\overline{\varphi'} = 0$ . La moyenne spatiale verticale est définie par  $\langle \overline{\varphi}(z,t) \rangle = L_z^{-1} \int \overline{\varphi}(z,t) \, dz$ , et fournit des quantités dépendant du temps. On utilise aussi la moyenne verticale sur une fraction de l'épaisseur de la couche de mélange, définie par

$$\langle \overline{\varphi} \rangle_{\beta}(t) = \frac{1}{2\beta h(t)} \int_{-\beta h(t)}^{\beta h(t)} \overline{\varphi}(z,t) \, dz, \qquad (5.2)$$

où  $\beta$  est une constante positive. Dans la suite, deux valeurs sont utilisées :  $\beta = 0.2$  et 0.8. La première sélectionne la zone la plus turbulente de la couche de mélange et la seconde la majorité de la couche. Une première conséquence de l'homogénéité est la nullité de la moyenne de la vitesse verticale. En effet, on a

$$\partial_i u_i = 0, \quad \partial_i \overline{u}_i = 0 \quad \text{et} \quad \partial_i u'_i = 0.$$
 (5.3)

Les dérivées horizontales de grandeurs moyennes étant nulles, on obtient  $\overline{u}_3 = constante$ . Le référentiel contenant le domaine de simulation est supposé immobile et cette constante est fixée à zéro. Le champ de vitesse moyen est ainsi

$$\overline{u}_1 \neq 0, \quad \overline{u}_2 \neq 0 \quad \text{et} \quad \overline{u}_3 = 0.$$
 (5.4)

## 5.1.2 Stabilité linéaire

La stabilité linéaire est étudiée avec les formules heuristiques de Duff *et al.* (1962) et le code de stabilité linéaire pseudo-spectral multidomaine SPECLMD (Gauthier *et al.*, 2005; Lafay & Gauthier, 2007). La formule de Duff *et al.* s'écrit

$$\sigma_{DHH} = \sqrt{\frac{At\,k}{\psi} + \frac{k^4}{Re^2}} - \left(\frac{1}{Re} + \frac{1}{Sc\,Re}\right)\,k^2.\tag{5.5}$$



FIGURE 5.1 – Gauche : résultats des trois méthodes utilisées pour mesurer le coefficient  $\alpha_b$ . Évolution temporelle de  $\alpha_{b1}$  (bleu),  $\alpha_{b2}$  (rouge) et  $\alpha_{b3}$  (noir). La valeur  $\alpha_b = 0.021$  est retenue. Milieu : demi-épaisseur de la couche de mélange  $h(t) = 3 \langle \overline{c} (1 - \overline{c}) \rangle$  (rouge) et loi d'échelle  $t^2$ (bleu). Droite : nombre de Reynolds externe  $Re_h = 4 \operatorname{Re} h \dot{h}$  (rouge) et loi d'échelle  $t^3$  (bleu).

Elle prend en compte les effets de viscosité et de diffusion. Le taux de croissance maximum, le nombre d'onde associé et le nombre d'onde de coupure sont

$$\sigma_{max} = 2.37 \quad \text{pour} \quad k_{max} = 101, \quad \text{et} \quad k_c = 264, \tag{5.6}$$

avec  $\psi = 1$  et pour At = 0.1,  $Re = 3 \times 10^4$  et Sc = 0.7. Ces paramètres sont ceux sélectionnés pour la simulation dont on détaille les résultats dans ce chapitre. Le code SPECLMD résout le problème linéaire pour les équations compressibles de Navier-Stokes. Des valeurs limites ont été choisies, pour la stratification (Sr = 0.1), le nombre de Prandtl ( $Pr = 10^{-4}$ ) et le coefficient adiabatique ( $\gamma = 10$ ). Les profils de masse volumique, température et concentration sont régularisés grâce à la fonction  $\operatorname{erf}(z/\delta)$ , avec  $\delta = 5 \times 10^{-3}$ . Cette valeur est aussi utilisée pour la simulation numérique. Les résultats fournis par le code SPECLMD sont légèrement inférieurs à ceux obtenus avec les formules de Duff

$$\sigma_{max} = 1.94 \quad \text{pour} \quad k_{max} = 93.8, \quad \text{et} \quad k_c = 260.$$
 (5.7)

# 5.2 Résultats de la simulation : généralités

Rappelons que le code AMÉNOPHIS résout les équations de Boussinesq (2.78) au moyen d'une méthode pseudo-spectrale Chebyshev-Fourier-Fourier (Le Creurer & Gauthier, 2008; Schneider *et al.*, 2015). Le profil initial de concentration est régularisé sous la forme

$$\bar{c}(z) = (1 + At) H_{+}(z) + (1 - At) H_{-}(z), \qquad (5.8)$$

où  $H_{\pm}(z) = (1 \pm \operatorname{erf}(z/\delta))/2$  et  $\delta$  est l'épaisseur de la pseudo-interface. La simulation est initialisée par un champ de vitesse solénoïdal multimode, construit avec un ensemble choisi de modes de Fourier. Le potentiel vecteur est construit en tirant aléatoirement les amplitudes des modes de Fourier  $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$  contenus dans l'anneau  $[k_{min}; k_{max}] = [150.8; 182.2]$ . Les paramètres physiques ont les valeurs suivantes : At = 0.10,  $Re = 3 \times 10^4$  et Sc = 0.7. La taille verticale du domaine est [-5:+5], la profondeur et la largeur ont une taille de 1. La résolution spatiale utilisée au début de la simulation comprend 24 sous-domaines de 30 polynômes Chebyshev et 600 points de collocation Fourier dans chacune des directions horizontales, soit 269 M points de collocation au total. À l'instant t = 8.9, la résolution est augmentée à  $(24 \times 30) \times 810^2 = 472 M$  et finalement, à partir de t = 12.4 la grille devient  $(24 \times$ 



FIGURE 5.2 – Gauche : longueurs caractéristiques de l'écoulement, en fonction du temps. Échelle de Kolmogorov  $\lambda_K$  compensée par  $t^{-1/4}$ ; échelle horizontale de Taylor de mélange  $\lambda_{cxy}$ , échelle verticale de Taylor de mélange  $\lambda_{cz}$ , échelle horizontale de Taylor de vitesse  $\lambda_{xx}$ , échelle verticale de Taylor de vitesse  $\lambda_{zz}$ , les quatre échelles de Taylor étant compensées par  $t^{1/2}$ ; échelle intégrale  $\ell$  et épaisseur de la couche de mélange entière  $\mathcal{L} = 2h$ , toutes deux compensées par  $t^2$ . Droite : temps de retournement des tourbillons  $\langle \overline{k}_b/\overline{\epsilon} \rangle_{\beta}$  en fonction du temps, avec  $\beta = 0.8$  et 0.2.

 $40) \times 940^2 = 848 M$ . Les paramètres physiques de la simulation A01-Sr0 sont regroupés dans le tableau 5.1. Le paramètre de raideur qui raccorde la discontinuité initiale de concentration est noté  $\delta_{mel}$ . Les perturbations initiales de vitesse sont décrites par leur amplitude  $x_{ini}$  et leur répartition modale dans le plan (x, y). Les nombres d'onde k des perturbations sont compris dans l'intervalle  $[k_{min}, k_{max}]$ . Enfin, la taille verticale du domaine de simulation est donnée par les cotes inférieure  $z_b$  et supérieure  $z_t$ . Quelques visualisations de la simulation A01-Sr0 sont présentées dans la section 4.2.2.

Nom	Sr	At	Re	Sc	$\delta_{mel}$	$x_{ini}$	$\left[k_{min},k_{max} ight]$	$z_t = -z_b$
A01-Sr0	0	0.10	$3 \times 10^4$	0.7	0.005	$-10^{-2}$	[150.8; 182.2]	5

TABLE 5.1 – Paramètres de lancement de la simulation A01-Sr0 en approximation de Boussinesq.

Il est assez classique de démarrer une étude d'une couche de mélange turbulente issue de l'instabilité de Rayleigh-Taylor par le calcul du préfacteur  $\alpha_b$ . On l'évalue au moyen de trois méthodes

$$\alpha_{b1} = \frac{h}{2 A t t}, \quad \alpha_{b2} = \frac{h^2}{4 A t h} \quad \text{et} \quad h = h_0 + \alpha_{b3} A t (t - t_0)^2, \tag{5.9}$$

où la seconde méthode utilise l'équation différentielle établie par Ristorcelli & Clark (2004) et la troisième utilise un ajustement de sa solution. Les résultats sont présentés sur la figure 5.1 (gauche). Les valeurs fournies par les deux premières méthodes dépendent fortement du temps, tandis que la troisième donne des résultats relativement indépendants de l'intervalle utilisé



FIGURE 5.3 – Composantes de l'énergie cinétique turbulente en fonction de la coordonnée z/h aux quatre instants t = 11.5, t = 12.9, t = 14.3 et t = 15.7. Gauche : composante horizontale  $\overline{u_x'^2}/2h$ . Droite : composante verticale  $\overline{u_z'^2}/2h$ . La tendance à la convergence vers un état auto-semblable est apparente.

pour l'ajustement de la courbe. La valeur  $\alpha_{b3} = 0.021$ , obtenue par l'ajustement sur l'intervalle  $9 \le t \le 15.7$ , est retenue. Elle se situe dans la partie inférieure de l'intervalle actuellement admis dans la littérature (Glimm et al., 2013; Youngs, 2013). La figure 5.1 (milieu) montre la demi-épaisseur de la couche de mélange  $h(t) = 3 \langle \overline{c} (1 - \overline{c}) \rangle$  en fonction du temps. À la fin de la simulation, son évolution montre un bon accord avec la loi d'échelle  $t^2$ , valide pour les couches de mélange auto-semblables. Les variations temporelles du nombre de Reynolds externe  $Re_h = 4 Re h \dot{h}$  sont présentées sur la figure 5.1 (droite) avec la loi d'échelle  $t^3$ . La correspondance est bonne.

Ces premiers résultats montrent que la simulation satisfait les critères classiques de qualité, à savoir la valeur du coefficient  $\alpha_b$ , et l'évolution de la demi-épaisseur h de la couche de mélange et du nombre de Reynolds externe  $Re_h$ . Avant une analyse plus poussée des résultats, il est également utile de tracer l'évolution temporelle des longueurs caractéristiques de l'écoulement. Les longueurs suivantes sont visibles sur la figure 5.2 (gauche).

- épaisseur de la zone de mélange,  $\mathcal{L} = 2h$ ;
- longueur intégrale,  $\ell = \langle \overline{k}_B^{3/2} / \overline{\varepsilon} \rangle_{\beta}$ ;
- échelle horizontale de Taylor de vitesse,  $\lambda_{xx}^2 = \langle \overline{u_x'^2} / (\overline{\partial_x u_x'})^2 \rangle_{\beta}$ ; échelle verticale de Taylor de vitesse,  $\lambda_{zz}^2 = \langle \overline{u_z'^2} / (\overline{\partial_z u_z'})^2 \rangle_{\beta}$ ;
- échelle de Kolmogorov,  $\lambda_K = (Re^3 \langle \overline{\varepsilon} \rangle_{\beta})^{-1/4};$
- échelle horizontale de Taylor de mélange,  $\lambda_{cxy}^2 = 2 \left\langle \overline{c'^2} / (\overline{(\partial_x c')^2} + \overline{(\partial_y c')^2}) \right\rangle_{\beta};$
- échelle verticale de Taylor de mélange,  $\lambda_{cz}^2 = \langle \overline{c'^2} / \overline{(\partial_z c')^2} \rangle_{\beta}$ ,

avec  $\beta = 0.2$  et compensées par leur loi de croissance respective.

La chronologie de la simulation est la suivante. Le régime linéaire se termine très tôt et les structures en forme de champignon apparaissent visuellement à l'instant  $t \approx 5.5$ . La transition à la turbulence se produit à  $t \approx 8.5$  et un plateau est atteint pour le rapport de l'échelle intégrale sur l'épaisseur de la couche de mélange :  $\ell/\mathcal{L} \approx 0.7$ . Le caractère autosemblable de l'écoulement apparaît à  $t \approx 11$ . Cette estimation est basée sur l'évolution du nombre de Reynolds externe  $Re_h$ . Finalement, la simulation est arrêtée à l'instant t = 15.7, où seules quelques bulles de grande taille sont encore présentes (figure 4.7). Le nombre de Reynolds basé sur la micro-échelle de Taylor est calculé dans la direction horizontale et dans la direction verticale

$$Re_{Tx} = Re \lambda_{xx} \left(2 \,\overline{k}_b\right)^{1/2} \quad \text{et} \quad Re_{Tz} = Re \,\lambda_{zz} \left(2 \,\overline{k}_b\right)^{1/2}, \tag{5.10}$$

où les opérateurs de moyenne  $\langle \rangle_{\beta}$  apparaissant dans les expressions de  $\lambda_{xx}^2$  et  $\lambda_{zz}^2$  sont supprimés. L'énergie cinétique turbulente en approximation de Boussinesq est notée  $k_b$  (voir équation (2.144)). Les nombres de Reynolds de Taylor obtenus dépendent donc de z et de t. Ils augmentent à mesure que la couche de mélange se développe et sont plus élevés au centre de la couche de mélange qu'aux frontières, non turbulentes. À l'instant final de la simulation A01-Sr0, on a  $Re_{Tx} \approx 86$  et  $Re_{Tz} \approx 142$ .

L'évolution du temps de retournement des tourbillons  $\langle \overline{k}_b/\overline{\varepsilon} \rangle_{\beta}$  est présenté sur la figure 5.2 (droite), avec  $\beta = 0.8$  et 0.2. Au centre de la couche de mélange, ce temps de retournement atteint un plateau à  $t \approx 14$ . Les instants t = 12.4 et 15.7 sont utilisés comme repères dans la suite de l'analyse. Ils correspondent respectivement à un moment où l'écoulement est turbulent et quasiment en croissance auto-semblable, et à l'instant de fin de la simulation où la croissance auto-semblable est mieux établie.

# 5.3 Vitesse, pression, énergie cinétique et dissipation

#### 5.3.1 Vitesse

L'état auto-semblable de la turbulence Boussinesq de l'instabilité de Rayleigh-Taylor a été étudié en détails par Ristorcelli & Clark (2004). En particulier, des lois d'échelles pour plusieurs quantités ont été présentées. Ces loi d'échelles sont utilisées ici pour vérifier le caractère auto-semblable de l'écoulement. La figure 5.3 présente la superposition des moments de vitesse  $\overline{u'_{x,z}}/2h$  (contributions à l'énergie cinétique turbulente) en fonction de la variable auto-semblable z/h. La convergence est correcte pour ces deux composantes. Notons que le support des profils de vitesse est plus grand que la largeur de la couche de mélange. Cela est lié à l'hétérogénéité des frontières, et aux quelques bulles en avance sur le reste des structures. La figure 5.4 confirme cette tendance à la convergence et permet d'observer comment l'écoulement passe d'un état majoritairement vertical vers un état turbulent plus ou moins isotrope.

On s'intéresse maintenant aux statistiques de la vitesse. Le coefficient de dissymétrie (skewness) d'une composante horizontale  $(\overline{u_x'^3}/\overline{u_x'^2}^{3/2})$  et de la composante verticale  $(\overline{u_z'^3}/\overline{u_z'^2}^{3/2})$  sont représentées sur la figure 5.5. Comme son nom le suggère, cette quantité mesure l'asymétrie de la densité de probabilité (PDF) de la quantité correspondante. Pour la composante x, le coefficient de dissymétrie n'a pas de structure particulière. Des valeurs faibles sont obtenues dans la couche de mélange, là où la turbulence est développée et le nombre de Reynolds maximal. Aux frontières, les valeurs sont plus élevées, conséquence de la présence des bulles. Le coefficient de dissymétrie de la composante z de la vitesse se présente sous la forme de deux pics positionnés environ à  $z/h = \pm 1.3$ . Ils correspondent aux frontières de la couche, et encadrent les valeurs très faibles de l'asymétrie de  $u_z'$  dans la couche. On peut donc s'attendre à ce que les densités de probabilité des fluctuations de vitesse soient symétriques.

Les coefficients d'aplatissement (appelé aussi kurtosis ou flatness) des deux composantes de vitesse sont tracés sur la figure 5.6. De même que précédemment, les frontières se traduisent par des pics. Dans la couche de mélange, les coefficients d'aplatissement sont proches


FIGURE 5.4 – Énergie cinétique turbulente  $\langle \overline{k} \rangle_{\beta}$  (noir) et ses composantes,  $\langle \overline{u'_x}^2 \rangle_{\beta}/2$  (bleu) et  $\langle \overline{u'_z}^2 \rangle_{\beta}/2$  (rouge), tracées en fonction du temps en échelles logarithmiques. Deux valeurs de  $\beta$ , 0.2 (gauche) et 0.8 (droite). Les résultats ne semblent pas dépendre de la valeur de  $\beta$ .



FIGURE 5.5 – Coefficient de dissymétrie (skewness) des fluctuations de vitesse en fonction de la variable auto-semblable z/h et à quatre instants, t = 11.5, t = 12.9, t = 14.3 et t = 15.7. Gauche : composante horizontale  $\overline{u_x'^3}/\overline{u_x'^2}^{3/2}$ . Droite : composante verticale  $\overline{u_z'^3}/\overline{u_z'^2}^{3/2}$ .



FIGURE 5.6 – Coefficient d'aplatissement (appelé aussi kurtosis ou flatness) des fluctuations de vitesse en fonction de la variable auto-semblable z/h aux instants t = 11.5, t = 12.9, t = 14.3 et t = 15.7. Gauche : composante horizontale  $\overline{u'_x^4}/\overline{u'_x^2}^2$ . Droite : composante verticale  $\overline{u'_z^4}/\overline{u'_z^2}^2$ . Le coefficient d'aplatissement d'un processus gaussien est représenté par la ligne pointillée noire.

de la valeur 3, qui correspond à un processus aléatoire de type gaussien. Ces tracés de coefficients de dissymétrie et d'aplatissement peuvent être rapprochés des densités de probabilités représentées sur la figure 5.7. La composante x des fluctuations de vitesse a un comportement gaussien, même au premier instant sélectionné t = 12.4. On observe seulement quelques petits écarts au caractère gaussien, pour les grandes valeurs. Ces constats sont aussi valides pour la composante z. Le comportement gaussien est associé aux interactions aléatoires (She *et al.*, 1990) et aucune structure particulière n'y est attaché. Notons que les densités de probabilité des fluctuations de vitesse ont été calculées en excluant les frontières de la couche de mélange. On constatera dans la section 5.4 que les gradients de vitesse ne présentent pas un comportement gaussien.

L'anisotropie de la couche de mélange Rayleigh-Taylor est un problème qui n'est pas totalement résolu. Trois indicateurs sont construits pour l'étudier. L'anisotropie d'un écoulement est classiquement mesuré par le tenseur d'anisotropie des contraintes de Reynolds

$$\overline{b}_{ij} = \frac{\overline{u'_i u'_j}}{2 \,\overline{k}_B} - \frac{1}{3} \,\delta_{ij}. \tag{5.11}$$

Cette quantité est principalement reliée aux grandes échelles. Le comportement de la composante  $b_{33}$  apparaît sur la figure 5.8. La nappe 2D de  $\bar{b}_{33}$  dans le plan (t, z) montre l'hétérogénéité de l'anisotropie dans la direction z. L'évolution temporelle de la moyenne  $\langle \bar{b}_{33} \rangle_{\beta}$  n'est pas totalement convergée. La décroissance de l'anisotropie est plus forte au cœur de la couche de mélange ( $\beta = 0.2$ ) que dans son ensemble. Plus la turbulence est forte, moins l'anisotropie est élevée. Ces constats sont en accord avec des résultats précédents, en effet Vladimirova & Chertkov (2009) et Boffetta *et al.* (2009) mesurent une anisotropie entre les deux composantes égale à  $w_{rms}/u_{rms} \approx 1.8$ . Cela correspond à la valeur  $b_{33} \approx 0.3$ .

L'anisotropie aux échelles intermédiaires et aux petites échelles est étudiée avec l'indicateur

$$B_{\partial_{k}^{(d)}u_{z}^{\prime}} = \left\langle \frac{(\partial_{k}^{(d)}u_{z}^{\prime})^{2}}{\overline{\partial_{k}^{(d)}u_{i}^{\prime}\,\partial_{k}^{(d)}u_{i}^{\prime}}} \right\rangle_{\beta} - \frac{1}{3}.$$
(5.12)



FIGURE 5.7 – Densités de probabilité des fluctuations de vitesse,  $u'_x$  (gauche) et  $u'_z$  (droite). Les densités de probabilité ont été calculées à partir du sous-espace  $[0:1;0:1;z_1:z_2]$ , où  $z_1$  et  $z_2$  sont définis par  $\overline{c}(z_1) = 0.4$  et  $\overline{c}(z_2) = 0.6$  (voir annexe C). Sur chaque graphe, la ligne pointillée montre la distribution gaussienne la plus proche de la densité de probabilité reconstituée (même moyenne et variance).



FIGURE 5.8 – Tenseur d'anisotropie des contraintes de Reynolds. Gauche : nappe 2D (t, z) de la composante  $\bar{b}_{33}$ . Droite : évolution de la valeur moyenne  $\langle \bar{b}_{33} \rangle_{\beta}$  en fonction du temps. Deux valeurs de  $\beta$  ont été utilisées, 0.2 (pointillés rouges) et 0.8 (ligne bleue).



FIGURE 5.9 – Anisotropies de vitesse calculées à partir de  $B_{\partial_k^{(d)}u'_z}$  (définition (5.12)). Gauche : anisotropie aux échelles intermédiaires  $B_{\partial_x^{(1)}u'_z}$  (bleu) et anisotropie aux petites échelles  $B_{\partial_x^{(2)}u'_z}$ (rouge). Droite : anisotropie aux échelles intermédiaires  $B_{\partial_z^{(1)}u'_z}$  (bleu) et anisotropie aux petites échelles  $B_{\partial_z^{(2)}u'_z}$  (rouge). Le retour à l'isotropie est plus rapide pour les échelles intermédiaires construites avec un gradient vertical. Deux valeurs de  $\beta$  ont été utilisées, 0.2 (traits pleins) et 0.8 (pointillés).

La sommation est faite sur l'indice *i* mais pas sur k = x, z. L'exposant (*d*) est l'ordre de la dérivation. La définition (5.12) généralise le tenseur d'anisotropie des contraintes de Reynolds (5.11) et fournit des informations sur le retour à l'isotropie des différentes échelles de l'écoulement, suivant la valeur choisie pour *d*. Pour d = 0, on a  $B_{\partial_k^{(0)}u'_z} \equiv b_{33}$  tandis que pour d = 1, cette quantité peut être vue comme une mesure de l'anisotropie aux échelles intermédiaires. Pour d = 2, on obtient l'anisotropie aux petites échelles. Des définitions équivalentes ont été introduites par Lin *et al.* (2011), appelées multivariances, et destinées à mesurer l'efficacité du mélange à différentes échelles.

L'évolution de ces indicateurs est donnée sur la figure 5.9. Dans tous les cas, on observe un lent retour à l'isotropie. Aucune de ces anisotropies n'est réellement convergée. Dans la direction horizontale, les échelles intermédiaires et les petites échelles ont environ le même taux d'anisotropie,  $B_{\partial_x^{(1)}u'_z} \approx B_{\partial_x^{(2)}u'_z} \approx 0.20$ . Cette anisotropie est positive, ce qui signifie que les échelles intermédiaires et les petites échelles de  $u'_z$  sont plus énergétiques que les composantes horizontales  $u'_{x,y}$ . La situation est différente dans la direction verticale, où les échelles intermédiaires et petites échelles ont un taux d'anisotropie différent. Elles sont toutes deux légèrement négatives. Aux échelles intermédiaires,  $B_{\partial_z^{(1)}u'_z} \approx -0.06$ , tandis qu'aux petites échelles  $B_{\partial_z^{(2)}u'_z} \approx -0.15$ . On constate qu'aux petites échelles,  $u'_z$  est dominée par les fluctuations dans les directions horizontales. Dans tous les cas, on observe que l'anisotropie ne dépend pas de la valeur de  $\beta$ . L'anisotropie moyennée sur le cœur de la couche de mélange est ainsi similaire à l'anisotropie calculée sur l'ensemble de la couche.

On peut utiliser un troisième indicateur pour caractériser l'anisotropie de vitesse. On définit

$$C_{\partial_{z}^{(d)}u_{i}'} = \left\langle \frac{(\partial_{z}^{(d)}u_{i}')^{2}}{\left|\nabla^{(d)}u_{i}'\right|^{2}}\right\rangle_{\beta} - \frac{1}{3}.$$
(5.13)



FIGURE 5.10 – Anisotropies de vitesse calculées depuis l'expression  $C_{\partial_z^{(d)}u'_i}$  (équation (5.13)). Gauche : anisotropie aux échelles intermédiaires  $C_{\partial_z^{(1)}u'_x}$  (bleu) et anisotropie aux petites échelles  $C_{\partial_z^{(2)}u'_x}$  (rouge). Droite : anisotropie aux échelles intermédiaires  $C_{\partial_z^{(2)}u'_x}$  (bleu) et anisotropie aux petites échelles  $C_{\partial_z^{(2)}u'_x}$  (rouge). Deux valeurs de  $\beta$  ont été utilisées, 0.2 (traits pleins) et 0.8 (pointillés).

Cette définition peut s'appliquer aux trois composantes de vitesse et permettra une comparaison directe avec les anisotropies de concentration calculées dans la section 5.5 et tracées sur la figure 5.31. Les quantités (5.13) sont présentées sur la figure 5.10 pour les vitesses horizontale et verticale d'une part, et pour les échelles intermédiaires et les petites échelles d'autre part. On constate que  $C_{\partial_z^{(1)}u'_x}$  et  $C_{\partial_z^{(2)}u'_x}$  convergent vers 0 tandis que  $C_{\partial_z^{(1)}u'_z} \approx -0.17$ et  $C_{\partial_z^{(2)}u'_z} \approx -0.24$ . Cela signifie que les fluctuations de vitesse horizontale sont presque isotropes par rapport au gradient vertical. En revanche, la composante verticale reste anisotrope tant aux échelles intermédiaires qu'aux petites échelles.

Les spectres d'énergie des fluctuations de vitesse  $u'_x$  et  $u'_z$ , compensés par  $k^{-5/3}$ , sont tracés sur la figure 5.11 à deux instants différents. Ces spectres sont calculées en effectuant une transformée de Fourier dans une direction horizontale et en moyennant les spectres obtenus dans la deuxième direction horizontale. Une moyenne verticale est également effectuée. Les spectres ne dépendent donc que du nombre d'onde horizontal  $k_x$  et du temps t. Il a été vérifié que les spectres dépendent très faiblement de l'étendue spatiale de la moyenne verticale. Une étroite zone inertielle est visible sur les deux spectres  $u'_x$  et  $u'_z$ . Elle est davantage établie pour la composante verticale. Étant donné que la turbulence Rayleigh-Taylor est continuellement alimentée, l'amplitude des coefficients des spectres augmentent continuellement. En parallèle, la plus grande longueur d'onde de l'écoulement devient de plus en plus grande (fusion de bulles) et le spectre s'élargit du côté des petits nombres d'onde. Par ailleurs, la turbulence devenant de plus en plus intense dans la couche de mélange, le spectre s'élargit aussi du côté des grands nombres d'onde.

Les densités de probabilité des fluctuations de pression sont tracées sur la figure 5.12 (gauche) à deux instants, t = 12.4 et t = 15.7. Les écarts au comportement gaussien et l'asymétrie apparaissent clairement sur ces graphes. Les régimes, côté valeurs positives et valeurs négatives, semblent proches d'un comportement exponentiel. Les pentes sont cependant très différentes, les valeurs négatives étant fortement dominantes sur les valeurs positives. Ces



FIGURE 5.11 – Spectres compensés des composantes de vitesse en fonction du nombre d'onde k, en échelles logarithmiques. Gauche : composante horizontale  $u'_x$ . Droite : composante verticale  $u'_x$ . Les spectres sont compensés par la loi d'échelle Kolmogorov  $k^{-5/3}$ . La ligne pointillée horizontale représente la loi Kolmogorov. Les lignes pointillées verticales correspondent, de gauche à droite, à l'échelle intégrale, l'échelle verticale de Taylor de vitesse, l'échelle horizontale de Taylor de vitesse et l'échelle de Kolmogorov.

caractéristiques sont cohérentes avec de précédentes observations sur des écoulements divers (Lesieur M., 1997, Section 8). Cela est aussi apparent dans une turbulente en déclin initialisée par des conditions de Taylor-Green (Brachet, 1991). La turbulence statistiquement stationnaire présente aussi ce comportement (Pumir, 1994*a*; Cao *et al.*, 1999) qui a été confirmé récemment pour la turbulence isotrope et en déclin (Kalelkar, 2006). Cette asymétrie est liée au fait que le centre des tourbillons correspond à des minimums de pression. Une forte vorticité est donc corrélée à de faibles fluctuations de pression. Il a été démontré par Pumir (1994*a*) que la partie sur-exponentielle de la densité de probabilité des fluctuations de pression est reliée à des fluctuations intermittentes de vorticité.

Le spectre des fluctuations de pression, compensé par la loi d'échelle  $k^{-7/3}$ , est tracé sur la figure 5.12 (droite). La zone inertielle est visible, et l'ensemble du spectre croît avec le temps.

#### 5.3.2 Spectres de flux de masse

La figure 5.13 montre le spectre compensé des flux de masse horizontal  $\rho' u'_x$  et vertical  $\rho' u'_x$ . Le spectre est compensé par la loi  $k^{-7/3}$ , donnée par Lumley (1967) pour prédire les effets de la flottabilité sur les spectres turbulents (voir aussi Kaneda & Yoshida (2004)). Dans ce cas, le résultat est mitigé et la zone inertielle n'est pas très visible.

#### 5.3.3 Dissipation

La dissipation est une des grandeurs clé dans un écoulement turbulent. Elle a été introduite dans les équations (2.150)-(2.151). Ristorcelli & Clark (2004) ont prouvé rigoureusement que la troisième composante de la dissipation  $\varepsilon_{zz}$  varie comme  $h^{1/2} \propto t$ . En outre, on trouve par analyse dimensionnelle que la dissipation croît linéairement avec le temps (Souffland *et al.*, 2002). Cette loi de croissance est utilisée ici pour vérifier le caractère auto-semblable des contributions de la dissipation. La figure 5.14 présente les contributions x écrite  $\overline{\partial_j u_1 \partial_j u_1}/Re h^{1/2}$ 



FIGURE 5.12 – Fluctuations de pression. Gauche : densité de probabilité des fluctuations de pression p' à deux instants, t = 12.4 et t = 15.7. Les distributions gaussiennes les plus proches sont tracées en pointillés. Des écarts au comportement gaussien sont nettement visibles, les densités de probabilité ont des ailes quasi-exponentielles et l'asymétrie apparaît clairement. Droite : spectre compensé des fluctuations de pression aux instants t = 12.4 et t = 15.7. La loi d'échelle  $k^{-7/3}$  a été utilisée (Monin & Yaglom, 1975, Vol. 2, pp 874). Les lignes pointillées verticales ont le même sens que sur la figure 5.11.



FIGURE 5.13 – Spectre compensé des flux de masse. Gauche : composante horizontale  $\rho' u'_x$ . Droite : composante verticale  $\rho' u'_z$ . La loi d'échelle de Lumley  $k^{-7/3}$  a été utilisée. Les lignes pointillées ont le même sens que sur la figure 5.11.



FIGURE 5.14 – Contributions  $\varepsilon_{jj}$  de la dissipation, en fonction de z/h et à quatre instants différents. Gauche : contribution x avec mise à l'échelle  $\frac{1}{Re}\overline{\partial_j u_1 \partial_j u_1}/h^{1/2}$ . Droite : contribution z avec mise à l'échelle  $\frac{1}{Re}\overline{\partial_j u_3 \partial_j u_3}/h^{1/2}$ .

(gauche) et z écrite  $\overline{\partial_j u_3 \partial_j u_3}/Re h^{1/2}$  (droite) de la dissipation en fonction de la variable auto-semblable z/h. La contribution z est plus proche de la convergence que la contribution x.

On peut obtenir une loi d'échelle pour l'évolution de la dissipation. Si la dissipation a atteint un régime auto-semblable, alors on a  $\overline{\varepsilon}(z,t) = h^{1/2}(t) \Upsilon(\xi)$ , où  $\Upsilon$  est la fonction de structure de la dissipation et  $\xi = z/h$ . Dans ce régime, on doit avoir  $\int_{-\infty}^{+\infty} \Upsilon(\xi) d\xi = C^{ste}$ . D'où

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\varepsilon}(z,t) \, dz \propto \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\varepsilon}(z,t) \, t^2 \, d\xi \propto t^3 \, \int_{-\infty}^{+\infty} \Upsilon(\xi) \, d\xi \propto t^3. \tag{5.14}$$

La dissipation moyennée sur l'ensemble de la couche de mélange (soit sur h(t)) s'exprime donc

$$\langle \overline{\varepsilon} \rangle_{\beta=1} = \frac{1}{h(t)} \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\varepsilon}(z,t) \, dz \propto t.$$
 (5.15)

Ce résultat est bien connu en turbulence homogène et isotrope (Sreenivasan, 1998). L'évolution de la moyenne de la dissipation et des contributions x et z est présentée sur la figure 5.15. Elles montrent un accord satisfaisant avec la loi (5.15).

La densité de probabilité de la dissipation est tracée sur la figure 5.16 à deux instants, t = 12.4 et t = 15.7. Étant donné que la dissipation est homogène au carré d'un gradient de vitesse, on trace également la densité de probabilité de la racine carrée de la dissipation,  $\varepsilon^{1/2}$ . Cette densité de probabilité présente une aile exponentielle dont la pente augmente avec le temps. Le comportement des valeurs les plus élevées évolue : sous l'exponentielle à t = 12.4, elle passe au-dessus de l'exponentielle à t = 15.7. Ce comportement est relié à l'intensification de l'intermittence.



FIGURE 5.15 – Taux de dissipation  $\varepsilon$ . Évolution des contributions x et z de la dissipation totale, moyennée sur l'ensemble de la couche de mélange ( $\beta = 1$ ). Les composantes s'accordent convenablement avec la loi de croissance linéaire (5.15). À l'inverse, la dissipation totale montre un très bon accord avec la loi de croissance linéaire.



FIGURE 5.16 – Densité de probabilité de la dissipation à deux instants. Gauche :  $\varepsilon$ . Droite :  $\varepsilon^{1/2}$ . Les ailes sont exponentielles. La pente augmente avec le temps, c'est-à-dire avec le nombre de Reynolds.



FIGURE 5.17 – Nappe (t, z) de vorticité. Gauche : composante x de la vorticité  $\overline{\omega_x^2}^{1/2}$ . Droite : composante z de la vorticité  $\overline{\omega_z^2}^{1/2}$ .

## 5.4 Vorticité

#### 5.4.1 Propriétés générales

Dans cette section est étudiée la vorticité, dont l'équation de transport a été établie dans la section 2.7.3 pour l'écoulement de Rayleigh-Taylor en approximation de Boussinesq. Les composantes de la vorticité, moyennées horizontalement, sont

$$\overline{\omega}_1 = -\partial_3 \overline{u}_2, \quad \overline{\omega}_2 = -\partial_3 \overline{u}_3 \quad \text{et} \quad \overline{\omega}_3 = 0,$$
(5.16)

puisque l'écoulement est solénoïdal et homogène dans les directions horizontales. Les équations de transport de ces moyennes s'écrivent

$$\partial_t \overline{\omega}_1 = \frac{1}{2} \overline{\omega'_3 \partial_3 u'_2} + \frac{1}{2} \overline{\omega'_3 \partial_1 u'_3} + \partial_3 (-\overline{\omega'_1 u'_3} + Re^{-1} \partial_3 \overline{\omega}_1),$$
  

$$\partial_t \overline{\omega}_2 = \frac{1}{2} \overline{\omega'_3 \partial_2 u'_3} + \frac{1}{2} \overline{\omega'_3 \partial_3 u'_2} + \partial_3 (-\overline{\omega'_2 u'_3} + Re^{-1} \partial_3 \overline{\omega}_2).$$
(5.17)

Dans ces équations d'évolution, il n'y a ni transport ni production barocline. Le terme barocline disparaît en raison des symétries de l'écoulement de Rayleigh-Taylor en approximation de Boussinesq. La production turbulente est limitée au terme d'étirement, c'est-à-dire la production à travers la corrélation entre la troisième composante de la vorticité et les gradients des composantes horizontales de la vitesse. Deux termes de diffusion sont présents, l'un turbulent et l'autre moléculaire. Étant donnée la forme de ces équations d'évolution, la valeur moyenne des composantes de vorticité n'apparaît pas pertinente pour l'étude de la vorticité. Notons qu'on ne rencontre pas de telles simplification dans le cas compressible, où la contribution barocline ne disparaît pas et s'écrit  $\varepsilon_{ijk} \overline{\partial_j \rho' \partial_k p'}$ .

On s'intéresse donc à la moyenne horizontale du carré de la vorticité. On écrit l'équation de transport suivante :

$$\partial_t \omega_i \,\omega_i + u_j \,\partial_j \omega_i \,\omega_i = 2 \,\omega_i \,D_{ij} \,\omega_j + 4 \,At \,\omega_i \left(-\delta_{i1} \,\partial_2 c + \delta_{i2} \,\partial_1 c\right) + Re^{-1} \,\partial_{jj}^2 \omega_i \,\omega_i - \varepsilon_\omega, \quad (5.18)$$

où on a introduit la dissipation du carré de la vorticité

$$\varepsilon_{\omega} = 2 \, R e^{-1} \, \partial_j \omega_i \, \partial_j \omega_i. \tag{5.19}$$



FIGURE 5.18 – Composantes de vorticité et loi d'échelle. Gauche :  $\overline{\omega_x^2}^{1/2}/h^{1/4}$  en fonction de la variable auto-semblable z/h aux instants t = 11.5, t = 12.9, t = 14.3 et t = 15.7. Droite :  $\overline{\omega_z^2}^{1/2}/h^{1/4}$  en fonction de z/h aux mêmes instants.

Dans cette équation (5.18), la sommation sur l'indice *i* peut être effectuée ou non. Si oui, l'équation concerne la norme de la vorticité, c'est-à-dire l'enstrophie (voir plus loin l'équation (5.27)). Si non, l'équation (5.18) conduit à écrire une équation pour chaque composante carrée de la vorticité

$$\partial_t \omega_1^2 + u_j \,\partial_j \omega_1^2 = 2\,\omega_1 \,D_{1j}\,\omega_j - 4\,At\,\omega_1\,\partial_2 c + Re^{-1}\,\partial_{jj}^2\omega_1^2 - \varepsilon_{\omega_1},\tag{5.20}$$

$$\partial_t \omega_2^2 + u_j \,\partial_j \omega_2^2 = 2\,\omega_2 \,D_{2j}\,\omega_j + 4\,At\,\omega_2\,\partial_1 c + Re^{-1}\,\partial_{jj}^2 \omega_2^2 - \varepsilon_{\omega_2},\tag{5.21}$$

$$\partial_t \omega_3^2 + u_j \,\partial_j \omega_3^2 = 2\,\omega_3 \,D_{3j}\,\omega_j + Re^{-1}\,\partial_{jj}^2 \omega_3^2 - \varepsilon_{\omega_3}.$$
(5.22)

Des termes de production barocline sont présents dans la direction horizontale, mais aucun n'apparaît dans la direction verticale. Rappelons que Ristorcelli & Clark (2004) ont démontré que la troisième composante de dissipation croît comme t ou  $h^{1/2}$  (voir figure 5.14). Pour des raisons de dimensions, on utilise la même loi d'échelle pour le carré de la vorticité. On peut alors écrire

$$\overline{\omega_i \,\omega_i}^{1/2}(z,t) = h^{1/4}(t)\,\Omega(\xi) \quad \text{avec} \quad \xi = z/h(t) \sim z/t^2.$$
(5.23)

De même, si la vorticité atteint un régime de croissance auto-semblable, on a  $\int_{-\infty}^{+\infty} \Omega(\xi) d\xi = C^{ste}$ , d'où

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\omega_i \,\omega_i}^{1/2}(z,t) \, dz \propto \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\omega_i \,\omega_i}^{1/2}(z,t) \, t^2 \, d\xi \propto t^{5/2} \, \int_{-\infty}^{+\infty} \Omega(\xi) \, d\xi \propto t^{5/2}. \tag{5.24}$$

En conséquence, la norme de la vorticité moyennée sur l'épaisseur de la couche de mélange évolue comme

$$\langle \overline{\omega_i \, \omega_i}^{1/2} \rangle \propto t^{1/2}.$$
 (5.25)

De même, les valeurs moyennes des composantes de vorticité  $\langle \overline{\omega_i^2}^{1/2} \rangle(t)$ , i = x, y, z doivent également évoluer comme  $t^{1/2}$ . C'est le cas pour la contribution x, mais l'accord avec cette loi est moins bon pour la contribution z (non montré).



FIGURE 5.19 – Vorticité. Gauche : norme de la vorticité  $\overline{\omega_i \, \omega_i}^{1/2} / h^{1/4}$  en fonction de z/h aux instants t = 11.5, t = 12.9, t = 14.3 et t = 15.7. Droite : anisotropie de vorticité  $\overline{\omega_z^2} / \overline{\omega_i \omega_i} - 1/3$  aux mêmes instants.

La figure 5.17 présente les nappes 2D (t, z) des composantes de vorticité horizontale  $\overline{\omega_x^2}^{1/2}$ et verticale  $\overline{\omega_z^2}^{1/2}$ . La composante horizontale atteint des valeurs plus élevées que la composante verticale et se développe plus tôt. En d'autres termes, elle a toutes les chances d'atteindre un état de croissance auto-semblable avant la composante verticale. Cela peut aussi s'observer depuis les tracés de la figure 5.18 où les deux contributions normalisées par  $h^{1/4}$  sont représentées en fonction de la variable auto-semblable z/h.

La norme de la vorticité est présentée sur la figure 5.19 (gauche) et présente un comportement auto-semblable exprimé par l'équation (5.23). L'anisotropie de vorticité calculée sous la forme  $\overline{\omega_z^2}/\overline{\omega_i\omega_i} - 1/3$  est tracée sur la même figure 5.19 (droite). Il semble que le régime permanent ne soit pas encore complètement atteint. La composante z de la vorticité n'est pas convergée.

Les densités de probabilité des composantes de vorticité sont tracées sur la figure 5.20, aux deux instants t = 12.4 et t = 15.7. Ces densités de probabilité présentent un caractère fortement non-gaussien, au contraire des densités de probabilité de fluctuations de vitesse (figure 5.7). Les ailes des densités de probabilité de vorticité sont exponentielles, la pente augmentant avec le temps et l'intensité de la turbulence. On note également la symétrie par rapport à la valeur  $\omega = 0$ . Ces comportements sont le signe d'organisation de l'écoulement aux échelles intermédiaires.

La norme du terme de production barocline de l'équation de vorticité est obtenue depuis l'équation (2.120). Son expression est  $2 At \left( \overline{(\partial_x c')^2}^{1/2} + \overline{(\partial_y c')^2}^{1/2} \right)$  et son évolution est présentée sur la figure 5.21. Cette nappe montre que la production barocline de l'équation de vorticité est maximale au centre de la couche de mélange. Son maximum temporel est atteint autour de l'instant de transition à la turbulence. Ensuite, le mélange provoque une diminution des gradients de masse volumique et donc des valeurs du terme barocline de l'équation de vorticité.



FIGURE 5.20 – Densités de probabilité de vorticité à deux dates différentes : t = 12.4 et t = 15.7. Gauche : composante horizontale  $\omega_x$ . Droite : composante verticale  $\omega_z$ . Les densités de probabilité ont été calculées à partir du sous-espace  $[0:1;0:1;z_1:z_2]$ , où  $z_1$  et  $z_2$  sont définis par  $\overline{c}(z_1) = 0.4$  et  $\overline{c}(z_2) = 0.6$  (voir annexe C).



FIGURE 5.21 – Nappe 2D (t, z) de la production barocline de l'équation de vorticité (2.120),  $2 At \left(\overline{(\partial_x c')^2}^{1/2} + \overline{(\partial_y c')^2}^{1/2}\right).$ 



FIGURE 5.22 – Gauche : bilan d'enstrophie. Termes source de l'équation (5.30) : étirement (bleu), production barocline de l'équation d'enstrophie (vert), opposé de la dissipation (rouge), et total des termes source (noir). Droite : rapports des valeurs absolues des contributions à l'équation d'enstrophie : terme d'étirement sur dissipation (bleu), terme d'étirement additionné au terme barocline divisés par la dissipation (vert). L'équilibre (valeur 1) est tracé en pointillés.

#### 5.4.2 Bilan d'enstrophie

L'expression de l'enstrophie s'écrit

$$\mathcal{E} = \int_{V} \omega_i \, \omega_i \, dV. \tag{5.26}$$

Avec l'équation (2.120) et les propriétés de symétrie (5.4), on obtient

$$d_t \mathcal{E} = \int_V 2\,\omega_i \,D_{ij}\,\omega_j \,dV + 4\,At\,\int_V (-\omega_1\,\partial_2 c + \omega_2\,\partial_1 c)\,dV + 2\,Re^{-1}\int_V \omega_i\,\partial_{jj}^2\omega_i\,dV.$$
(5.27)

Après une intégration par parties, le dernier terme de l'équation (5.27) peut aussi s'écrire

$$\int_{V} \omega_{i} \partial_{jj}^{2} \omega_{i} \, dV = \omega_{i} \partial_{j} \omega_{i} \big|_{\mathcal{S}} - \int_{V} \partial_{j} \omega_{i} \, \partial_{j} \omega_{i} \, dV \equiv -(Re/2) \, \varepsilon_{\omega^{2}}.$$
(5.28)

Le deuxième terme source de l'équation (5.27) est

$$\int_{V} (-\omega_1 \,\partial_2 c + \omega_2 \,\partial_1 c) \,dV = \int (-\overline{\omega_1 \,\partial_2 c} + \overline{\omega_2 \,\partial_1 c}) \,dz = \int (-\overline{\omega_1' \,\partial_2 c'} + \overline{\omega_2' \,\partial_1 c'}) \,dz.$$
(5.29)

Et finalement, l'équation (5.27) se réécrit

$$d_t \mathcal{E} = 2 \, \int \overline{\omega_i \, D_{ij} \, \omega_j} \, dz - 4 \, At \, \int \overline{\omega_1' \, \partial_2 c'} \, dz + 4 \, At \, \int \overline{\omega_2' \, \partial_1 c'} \, dz - \int \overline{\varepsilon_{\omega^2}} \, dz, \tag{5.30}$$

où l'expression de la dissipation est donnée par l'équation (5.19). Les contributions du membre de droite ont été tracées en fonction du temps sur la figure 5.22. Le terme de production barocline de l'équation d'enstrophie augmente pendant la première partie de la simulation et atteint une valeur presque constante peu après la transition à l'état de croissance autosemblable. Les termes d'étirement et de dissipation sont d'intensité comparable et opposée.



FIGURE 5.23 – Fraction de mélange moléculaire  $\theta(z,t) = \overline{c(1-c)}/\overline{c}(1-\overline{c})$ . Gauche : nappe 2D (t,z). Droite :  $\theta$  en fonction de la variable auto-semblable z/h aux instants t = 11.5, t = 12.9, t = 14.3 et t = 15.7.

Ils surpassent vite le terme barocline, à  $t \approx 10$ . La contribution totale garde une valeur faible en regard des intensités des différents termes sources. Excepté une augmentation sensible à  $t \approx 14$ , la contribution totale n'est que lentement variable pendant la phase de croissance auto-semblable. La couche de mélange est donc en déséquilibre permanent, et l'enstrophie augmente avec le temps.

Le tracé des rapports des termes sources sur la dissipation (graphe de droite de la figure 5.22) permet d'observer l'importance du terme barocline pour la production d'enstrophie les premières phases de l'instabilité. En outre, la convergence temporelle des termes de l'équation d'enstrophie à l'instant final de la simulation est satisfaisante.

### 5.5 Mélange

150

Le mélange est maintenant étudié avec les mêmes méthodes, c'est-à-dire l'analyse des moments, densités de probabilité, indicateurs d'anisotropie et spectres. La figure 5.23 (gauche) montre une nappe 2D de la fraction de mélange moléculaire  $\theta(z,t) = c(1-c)/\overline{c}(1-\overline{c})$  (Dalziel et al., 1999). À la fin de la simulation, elle est assez homogène spatialement, excepté aux frontières. Le régime auto-semblable est donc atteint pour cette quantité. Cela est confirmé par le tracé de  $\theta(z,t)$  (figure 5.23, droite) en fonction de la variable auto-semblable z/h à quatre instants. La superposition est acceptable. La variance des fluctuations de concentration,  $\overline{c'^2}^{1/2}$ est représentée sur la figure 5.24 (gauche). Ces courbes se superposent bien, ce qui traduit le fait que  $\overline{c'^2}^{1/2}$  évolue de façon auto-semblable. Le maximum spatial de cette variance est localisé au cœur de la couche de mélange, autour de z = 0. Il atteint une valeur asymptotique  $\overline{c'^2}^{1/2} \approx 0.25$ . Le graphe de droite de la figure 5.24 montre la moyenne verticale de la fraction de mélange moléculaire, qu'on note  $\langle \theta \rangle_{\beta}(t)$ . Cette quantité vaut 1 au début de la simulation, les deux fluides étant totalement séparés à l'état initial. Elle chute à une valeur de 0.76 après la transition à la turbulence et croît ensuite lentement vers une valeur de 0.79. Cela est en bon accord avec les données expérimentales de Linden et al. (1994), Dalziel et al. (1999) et Ramaprabhu & Andrews (2004b). Ils ont observé que la fraction de mélange moléculaire reste constante dans la couche de mélange autour des valeurs 0.75-0.80.



FIGURE 5.24 – Concentration. Gauche : variance des fluctuations de concentration  $\overline{c'}^{2^{1/2}}$ , en fonction de la variable auto-semblable z/h. Le régime auto-semblable est montré par la superposition des courbes à quatre instants, t = 11.5, t = 12.9, t = 14.3 et t = 15.7. Droite : fraction de mélange moléculaire  $\langle \theta \rangle_{\beta} = \langle \overline{c(1-c)}/\overline{c}(1-\overline{c}) \rangle_{\beta}$  en fonction du temps. Deux valeurs de  $\beta$  ont été utilisées, 0.2 (pointillés rouges) et 0.8 (ligne bleue).



FIGURE 5.25 – Statistiques du mélange. Gauche : coefficient de dissymétrie des fluctuations de concentration,  $\overline{c'^3}/\overline{c'^2}^{3/2}$ . Droite : coefficient d'aplatissement des fluctuations de concentration,  $\overline{c'^4}/\overline{c'^2}^2$ . Ces quantités sont tracées en fonction de la variable auto-semblable à quatre instants t = 11.5, t = 12.9, t = 14.3 et t = 15.7. Le coefficient d'aplatissement d'un processus gaussien est représenté par des pointillés horizontaux.



FIGURE 5.26 – Statistiques du mélange. Coefficient de dissymétrie du gradient des fluctuations de concentration, en fonction de la variable auto-semblable z/h, à quatre instants t = 11.5, t = 12.9, t = 14.3 et t = 15.7. Gauche : gradient horizontal  $\overline{(\partial_x c')^3}/\overline{(\partial_x c')^2}^{3/2}$ . Droite : gradient vertical  $\overline{(\partial_z c')^3}/\overline{(\partial_z c')^2}^{3/2}$ .

Le coefficient de dissymétrie des fluctuations de concentration est représentée sur la figure 5.25 (gauche). Notons que cette quantité a atteint le régime de croissance auto-semblable. Les valeurs sont importantes aux bords de la couche de mélange, négatives du côté supérieur de la couche et positif côté inférieur. À l'intérieur de la couche de mélange, l'asymétrie est presque nulle. Rappelons qu'une asymétrie entre les deux côtés de la couche de mélange n'apparaît que si le nombre d'Atwood est suffisamment élevé et que le modèle physique capture l'effet de compressibilité. Ce n'est pas le cas ici, et les faibles valeurs du coefficient de dissymétrie dans la couche ne sont donc pas surprenantes. Quant au coefficient d'aplatissement des fluctuations de concentration (figure 5.25, droite, tracé en échelles semi-logarithmique), il présente également un régime de croissance auto-semblable. Le coefficient d'aplatissement varie avec l'éloignement au centre de la couche de mélange. Au centre, il prend la valeur minimale de 2.5 environ. Sur les bords, il dépasse 3, la valeur d'un processus gaussien. Les fluctuations de concentration ne sont donc pas tout à fait gaussiennes. Cela sera confirmé par la figure 5.28. Le coefficient de dissymétrie des gradients horizontaux et verticaux des fluctuations de concentration sont tracés sur la figure 5.26. Le premier,  $\overline{(\partial_x c')^3}/\overline{(\partial_x c')^2}^{3/2}$ , est très proche de zéro dans la couche de mélange et présente quelques oscillations sans structure particulière aux frontières. On s'attend donc à ce que la densité de probabilité de  $\partial_x c'$  soit symétrique. La deuxième,  $\overline{(\partial_z c')^3}/\overline{(\partial_z c')^2}^{3/2}$ , a atteint un régime auto-semblable. Les frontières se traduisent par des valeurs élevées tandis que dans la couche de mélange, on observe une valeur presque uniforme de l'asymétrie. La densité de probabilité du gradient vertical des fluctuations de concentration est donc asymétrique, ce qui sera confirmé par le tracé des densités de probabilité sur la figure 5.29.

Les coefficients d'aplatissement de ces deux gradients de fluctuations de concentration sont tracées sur la figure 5.27. Ils présentent une allure similaire. Les frontières de la couche de mélange se traduisent par des valeurs élevées et l'intérieur de la couche par des valeurs lentement variables. Le minimum est atteint près du plan médian z = 0, il est de 10 pour le coefficient d'aplatissement du gradient horizontal et de 20 pour le gradient vertical. Ces



FIGURE 5.27 – Statistiques du mélange. Coefficient d'aplatissement des gradients des fluctuations de concentration, en fonction de la variable auto-semblable z/h, à quatre instants t = 11.5, t = 12.9, t = 14.3 et t = 15.7. Gauche : gradient horizontal,  $(\partial_x c')^4/((\partial_x c')^2)^2$ . Droite : gradient vertical,  $(\partial_z c')^4/((\partial_z c')^2)^2$ . Le coefficient d'aplatissement d'un processus gaussien est représenté par la ligne pointillée horizontale.

valeurs sont nettement supérieures à 3, les gradients de concentration ne se comportent pas comme des processus gaussiens. Cela traduit une organisation de l'écoulement aux échelles intermédiaires.

Les densités de probabilité des fluctuations de concentration c' sont tracées sur la figure 5.28. Le graphe de gauche présente les densités de probabilité à deux instants différents. Elles sont calculées à partir de la zone centrale de la couche de mélange, pour  $z_1 \leq z \leq z_2$ , où les cotes sont définies à partir de la concentration moyenne :  $\bar{c}(z_1) = 0.4$  et  $\bar{c}(z_2) = 0.6$ . Comme prévu par le coefficient de dissymétrie des fluctuations de concentration (figure 5.25, gauche), les densités de probabilité sont symétriques et proches d'un processus gaussien bien que quelques écarts soient visibles. Pour étudier ces écarts, le domaine utilisé pour le calcul des densités de probabilité est modifié. Il reste symétrique mais sa taille varie, pilotée par  $\overline{c}_1 \leq \overline{c} \leq \overline{c}_2$ . Le résultat est tracé sur la figure 5.28 (droite). Notons que les fluctuations de concentration respectent l'inégalité  $-\overline{c}_2 \leq c' \leq 1 - \overline{c}_1$  en raison du caractère borné de la concentration c. La densité de probabilité calculée sur l'espace  $\bar{c}_1 = 0.49 \leq \bar{c} \leq \bar{c}_2 = 0.51$ est déformée par cette contrainte et des valeurs supérieures à la gaussienne apparaissent aux frontières. La densité de probabilité calculée avec la majorité de la couche de mélange,  $0.10 \le \overline{c} \le 0.90$ , présente également des dépassements possiblement liés à l'écoulement peu turbulent aux frontières de la couche de mélange. Les deux autres densités de probabilité sont satisfaisantes. On peut conclure que les fluctuations de concentration sont gaussiennes avec quelques perturbations liées aux frontières de la couche de mélange et au caractère borné de la concentration.

Les densités de probabilité des gradients horizontaux et verticaux des fluctuations de concentration sont présentés sur la figure 5.29. Leur allure est différente. La densité de probabilité du gradient horizontal  $\partial_x c'$  est symétrique, comme attendu compte tenu du coefficient de dissymétrie de cette grandeur, proche de zéro (figure 5.26). Les ailes de cette densité de probabilité sont exponentielles et donc logiquement éloignées d'une gaussienne. Cela traduit une organisation des fluctuations de concentration aux échelles intermédiaires. La densité de



FIGURE 5.28 – Statistiques du mélange. Densités de probabilité des fluctuations de concentration c'. Gauche : densités de probabilité calculés à deux instants différents et pour  $0.4 \leq \overline{c} \leq 0.6$ . Droite : densités de probabilité calculées à t = 15.7 et sur quatre domaines verticaux  $\overline{c}_1 \leq \overline{c} \leq \overline{c}_2$  différents.

probabilité du gradient vertical des fluctuations de concentration  $\partial_z c'$  n'est pas symétrique, conformément aux valeurs non-nulles de son asymétrie (voir figure 5.26). Cela a été observé par Pumir (1994b) pour une turbulence homogène isotrope avec gradient moyen de concentration imposé (la concentration étant un scalaire passif, à toutes les échelles). Les ailes de cette densité de probabilité sont exponentielles, la pente associée aux valeurs négatives du gradient  $\partial_z c'$  étant bien plus raide que la pente des valeurs positives. Cela signifie que les grandes valeurs positives du gradient vertical des fluctuations de concentration ne sont pas rares. L'amplitude de ce phénomène est ici plus forte que dans l'étude de Pumir (1994b). Or, la concentration dans un écoulement Rayleigh-Taylor est parfois considérée comme passive aux échelles intermédiaires et aux petites échelles. L'importante asymétrie de la densité de probabilité du gradient vertical des fluctuations de concentration contredire ce fait.

Pour étudier le mélange à différentes échelles, on utilise les multivariances  $\langle |\nabla^{(d)} c'|^2 \rangle_{\beta}$ (Lin *et al.*, 2011) et l'indicateur d'anisotropie de mélange  $C_{\partial_z^{(d)}c'}$ , défini à l'équation 5.13. L'indicateur concerne les grandes structures pour d = 0, les échelles intermédiaires pour d = 1 et les petites échelles pour d = 2. L'anisotropie  $C_{\partial_{\alpha}^{(d)}c'}(t,z)$  est tracée sur la figure 5.30 pour d = 1. La nappe 2D montre des oscillations spatiales dans la direction z, confirmées par le tracé de l'indicateur en fonction de la variable auto-semblable z/h. Les multivariances aux ordres 0, 1 et 2 sont représentées sur la figure 5.32. Elles décrivent l'efficacité du mélange respectivement aux grandes échelles, aux échelles intermédiaires et aux petites échelles. Ces quantités sont nulles dans un fluide pur ou pour un mélange parfait. Le maximum de ces multivariances survient au moment de la transition à la turbulence. Après cet instant, à mesure que la turbulence se développe vers des échelles de plus en plus petites, les deux fluides se mélangent de plus en plus efficacement. Étant donné que les grandes échelles sont responsables de l'entrainement de fluide pur au repos dans la couche de mélange en croissance permanente, la multivariance d'ordre 0 reste élevée. Le mélange semble plus efficace aux échelles intermédiaires qu'aux petites échelles. L'anisotropie aux petites échelles peut être liée au ralentissement du mélange par rapport aux échelles intermédiaires quasiment isotropes. L'évolution des indicateurs d'anisotropie (définition 5.13), moyennés dans la direction z sur



FIGURE 5.29 – Densités de probabilité des gradients de fluctuations de concentration. Gauche : densité de probabilité du gradient horizontal  $\partial_x c'$ . Droite : densité de probabilité du gradient vertical  $\partial_z c'$ . La densité de probabilité du gradient horizontal est symétrique par rapport à zéro au contraire de la densité de probabilité du gradient vertical (voir figure 5.26). Les densités de probabilité ont été construites sur le domaine  $[0:1;0:1;z_1:z_2]$ , où  $z_1$  et  $z_2$  sont définis par  $\overline{c}(z_1) = 0.4$  et  $\overline{c}(z_2) = 0.6$ .



FIGURE 5.30 – Anisotropie de mélange aux échelles intermédiaires  $C_{\partial_z^{(1)}c'}$ . Gauche : nappe 2D (t, z). Droite : en fonction de la variable auto-semblable z/h et aux instants t = 11.5, t = 12.9, t = 14.3 et t = 15.7.



FIGURE 5.31 – Anisotropies de gradients de concentration en fonction du temps. L'anisotropie de mélange est définie par  $C_{\partial_z^{(1)}c'}$  (équation 5.13) aux échelles intermédiaires (gauche) et par  $C_{\partial_z^{(2)}c'}$  aux petites échelles (droite). Deux valeurs de  $\beta$  sont utilisées, 0.2 (pointillés rouges) et 0.8 (ligne bleue). Les valeurs finales d'anisotropie sont environ 0.03 pour les échelles intermédiaires et 0.10 pour les petites échelles.

une partie de la couche de mélange,  $\langle C_{\partial_z^{(d)}c'}\rangle_{\beta}(t)$ , est tracée sur la figure 5.31 (gauche). La valeur à la fin de la simulation est d'environ 0.03, ce qui signifie que les échelles intermédiaires du mélange sont isotropes. Pour d = 2, les variations selon l'axe z sont similaires au cas d = 1 (figure 5.30) et ne sont pas représentées ici. La moyenne de l'anisotropie de mélange aux petites échelles sur une partie de la couche de mélange est bien convergée en fonction du temps (voir la figure 5.31, droite). La valeur à l'instant final est de 0.10 environ. Aux petites échelles, le mélange reste légèrement anisotrope.

Pour finir, le spectre des fluctuations de concentration, compensé par la loi  $k^{-5/3}$ , est tracé sur la figure 5.32. L'échelle intégrale, les échelles horizontale et verticale de Taylor de mélange et l'échelle de Kolmogorov sont représentées. La zone inertielle est étroite mais bien visible.

# 5.6 Bilan

On a présenté dans ce chapitre les résultats d'une simulation numérique directe d'une couche de mélange turbulente en approximation de Boussinesq. Le code de simulation utilisé est Aménophis et s'appuie sur une méthode pseudo-spectrale (voir chapitre 3). La résolution spatiale a été augmentée jusque  $(24 \times 40) \times 940^2 = 848 M$  points de collocation. Le nombre de Reynolds basé sur la micro-échelle verticale de Taylor atteint  $Re_{\lambda} \approx 142$ . La constante de croissance auto-semblable de la couche de mélange est calculée à  $\alpha_b = 0.021$ . Le régime turbulent, suivi d'un régime auto-semblable et de la transition de mélange sont les objectifs poursuivis par ce type d'étude. Ici, la première étape est clairement atteinte, le nombre de Reynolds de Taylor, les densités de probabilité et diverses autres quantités attestant du caractère turbulent de l'écoulement. Cependant, l'état auto-semblable n'est que partiellement vérifié et la transition de mélange n'a pas été atteinte. Pour l'heure, aucune simulation numérique directe avec le modèle de Boussinesq n'a atteint la transition de mélange. Ce chapitre s'est focalisé sur le mélange et la vorticité. Les conclusions sont les suivantes :



FIGURE 5.32 – Gauche : moyenne spatiale des multivariances de concentration pour les grandes échelles, les échelles intermédiaires et les petites échelles,  $\langle \overline{c'^2} \rangle_{\beta}$  (bleu),  $\langle |\nabla c'|^2 \rangle_{\beta}$  (rouge) et  $\langle |\nabla^2 c'|^2 \rangle_{\beta}$  (noir). Chacune de ces quantités est normalisée par son maximum temporel. Droite : spectre des fluctuations de concentration c', compensé par la loi  $k^{-5/3}$ , à deux instants différents. La ligne pointillée horizontale correspond à la loi d'échelle de Kolmogorov. Les pointillés verticaux correspondent (de gauche à droite) à l'échelle intégrale, l'échelle horizontale de Taylor de mélange, l'échelle verticale de Taylor de mélange et à l'échelle de Kolmogorov.

(i) Une étroite zone inertielle est observée. Les spectres sont compatibles avec la loi d'échelle  $k^{-5/3}$  pour les fluctuations de vitesse et de concentration et avec la loi d'échelle  $k^{-7/3}$  pour la pression. Les spectres de flux de masse ne semblent pas incompatibles avec la loi  $k^{-7/3}$ .

(*ii*) Les quantités moyennes ont atteint un régime auto-semblable, mais les nappes 2D révèlent de fréquentes hétérogénéités dans la direction verticale. Pour les quantités d'ordre élevé ou dérivées, le régime auto-semblable n'est pas complètement atteint. D'une manière générale, les statistiques liées au mélange sont mieux convergées que les statistiques liées à la dynamique. Les coefficients de dissymétrie et d'aplatissement de la concentration et des gradients de concentration présentent une convergence satisfaisante, tandis que les anisotropies impliquant les composantes de vitesse ou de gradients de vitesse ne sont pas convergées. La composante verticale de la vorticité ne semble pas convergée non plus.

(*iii*) Dans le régime de croissance auto-semblable, on peut établir théoriquement que la dissipation et le carré de la vorticité, moyennés sur l'épaisseur de la couche de mélange, suivent respectivement les lois d'échelle suivantes,  $\langle \overline{\varepsilon} \rangle \propto t$  et  $\langle \overline{\omega_i \omega_i}^{1/2} \rangle \propto t^{1/2}$ . Les données de la simulation sont en accord avec ces lois.

*(iv)* L'étude de la vitesse et de la vorticité montrent que les plus grandes échelles de l'écoulement, présentes aux frontières de la couche de mélange, gardent la mémoire de l'instabilité qui a généré la turbulence, c'est-à-dire qu'elles gardent une structure en forme de tore. Les grandes échelles de vitesse ont un comportement gaussien qui est associé aux interactions aléatoires. Les densités de probabilité de la vorticité ont un comportement exponentiel, ceci étant lié au caractère turbulent de l'écoulement et à l'intermittence. La densité de probabilité de la dissipation permet également d'observer que cette quantité se comporte très différemment d'une gaussienne. Les phénomènes extrêmes de dissipation sont de plus en plus probables à mesure que le temps augmente et que la turbulence s'intensifie.

(v) Les propriétés de la vorticité et de l'enstrophie ont été détaillées. Les équations pour la vorticité moyenne et l'enstrophie ont été écrites en approximation de Boussinesq. Le terme de production barocline de l'équation de vorticité est nul dans la direction z. Les termes d'étirement et de dissipation de l'équation d'enstrophie dominent largement la production barocline d'enstrophie.

(vi) La densité de probabilité de pression est typique d'un écoulement turbulent. Les écarts au comportement gaussien sont clairs et la densité de probabilité est fortement asymétrique. Ce comportement est lié à la présence de tourbillons.

(vii) Plusieurs indicateurs d'anisotropie ont été utilisés pour qualifier les différentes échelles de l'écoulement. Les échelles intermédiaires de mélange sont isotropes, et les petites échelles restent légèrement anisotropes. Une influence significative de la flottabilité aux petites échelles ne peut donc pas être écartée. Cela serait aussi une explication de l'étroitesse de la zone inertielle des spectres, celle-ci étant causée par des effets de flottabilité aux petites échelles. Concernant les vitesses, les échelles intermédiaires sont isotropes et les petites échelles anisotropes. Ce résultat est cohérent avec le constat fait pour le mélange.

(viii) La densité de probabilité des fluctuations de concentration est quasi-gaussienne, tandis que les densités de probabilité des gradients sont fortement non-gaussiennes. De plus, le gradient vertical des fluctuations de concentration est asymétrique. Ceci également élève des doutes sur le caractère passif du scalaire aux petites échelles dans la turbulence Boussinesq Rayleigh-Taylor.

# CHAPITRE 6 Résultats des simulations avec le modèle anélastique

#### Sommaire

6.1 Influence des paramètres de compressibilité sur les premières phases								
de croissance anélastique								
6.1.1	Paramètres des simulations							
6.1.2	Analyse linéaire							
6.1.3	Croissance linéaire et non linéaire							
6.1.4	Visualisations des états finaux atteints							
6.1.5	Analyses complémentaires : température, divergence et nombre de Mach 168							
6.2 Couche de mélange turbulente anélastique								
6.2.1	Généralités							
6.2.2	Vitesse, pression, énergie cinétique et dissipation							
	6.2.2.1 Dissipation							
	6.2.2.2 Vorticité							
6.2.3	Mélange							
6.2.4	Compressibilité et effets thermiques							
6.3 Bilan								

Ce chapitre est dédié à l'analyse de quatre simulations effectuées avec l'option anélastique du code Aménophis. Dans une première partie, on s'intéresse aux effets de compressibilité en comparant les premières phases de croissance de l'instabilité pour trois simulations. Dans un deuxième temps, une simulation anélastique a été menée jusqu'à l'état de couche de mélange turbulente anélastique. Ses résultats sont discutés.

# 6.1 Influence des paramètres de compressibilité sur les premières phases de croissance anélastique

#### 6.1.1 Paramètres des simulations

On réalise trois simulations anélastiques qu'on arrête avant la transition à la turbulence. Le but est d'étudier les premières phases de la croissance de l'instabilité. Le tableau 6.1 regroupe les paramètres physiques et numériques de ces simulations. Le paramètre de raideur qui raccorde la discontinuité initiale de concentration est noté  $\delta_{mel}$  (voir équation (3.1)). Les perturbations initiales de vitesse sont décrites par leur amplitude  $x_{ini}$  et leur répartition modale dans le plan (x, y). Les nombres d'onde k des perturbations sont compris dans l'intervalle  $[k_{min}, k_{max}]$ . Enfin, la taille verticale du domaine de simulation est donnée par les cotes inférieure  $z_b$  et supérieure  $z_t$ . Le seul paramètre physique qui varie entre les simulations A25-Sr2

et A5-Sr2 est le nombre d'Atwood; le seul paramètre qui varie entre les simulations A5-Sr2 et A5-Sr04 est la stratification Sr. Ces deux comparaisons peuvent donner des informations sur l'influence du nombre d'Atwood et du paramètre de stratification sur la croissance de l'instabilité de Rayleigh-Taylor en régime anélastique. La température et la compressibilité sont étudiées.

Nom	Sr	At	Re	Sc	Pr	$\gamma$	$\delta_{mel}$	$x_{ini}$	$[k_{min}, k_{max}]$	$z_t = -z_b$
A25-Sr2	2	0.25	$3  imes 10^4$	0.7	0.7	5/3	0.01	$-10^{-2}$	[150.8; 182.2]	1.5
A5-Sr2	2	0.50	"	"	"	"	0.005	"	"	1.0
A5-Sr04	0.4	0.50	"	"	"	"	"	"	"	"
A01-Sr04	0.4	0.10	"	"	"	"	"	"	"	"

TABLE 6.1 – Paramètres de lancement des simulations anélastiques. Les coefficients adiabatiques des fluides lourd et léger sont égaux pour toutes les simulations. La simulation A25-Sr2 a été réalisée en premier. Pour les suivantes, la taille du domaine de calcul a été réduit car on ne s'intéresse qu'aux premières phases de croissance. En outre, la raideur du raccord de la discontinuité de concentration et de masse volumique a été augmentée. Les trois simulations sont initialisées avec la même gamme de longueurs d'onde. Chaque simulation a été arrêtée avant que le maximum spatial du paramètre de compressibilité  $\gamma Ma^2$  ne devienne non négligeable devant 1.

Les grilles de points de collocation utilisées pour ces simulations sont les suivantes :

- Simulation A25-Sr2. Six grilles différentes utilisées. Démarrage à  $(8 \times 32) \times 256^2 = 17 M$  de points et arrêt du calcul avec une grille de  $(20 \times 48) \times 816^2 = 639 M$  de points.
- Simulation A5-Sr2. Deux grilles différentes utilisées. Démarrage à  $(8 \times 48) \times 384^2 = 57 M$  de points et arrêt du calcul avec une grille de  $(14 \times 48) \times 600^2 = 242 M$  de points.
- Simulation A5-Sr04. Trois grilles différentes utilisées. Démarrage à  $(10 \times 48) \times 528^2 = 126 M$  de points et arrêt du calcul avec une grille de  $(14 \times 48) \times 816^2 = 320 M$  de points.
- Simulation A01-Sr04. Six grilles différentes utilisées. Démarrage à  $(8 \times 48) \times 384^2 = 57 M$  de points et arrêt du calcul avec une grille de  $(30 \times 48) \times 816^2 = 958 M$  de points.

Comme évoqué à la section 3.5.5, des analyses spectrales sont réalisées chaque fois qu'une grille de points de collocation commence à devenir insuffisante. Elles guident les directions d'augmentation du nombre de points.

#### 6.1.2 Analyse linéaire

Hammouch (2012) a observé en étudiant la solution du problème linéaire pour des fluides parfaits que la stratification a une influence sur le taux de croissance des petits nombres d'onde, qui est d'autant plus faible que Sr est grand. On retrouve que la compressibilité a un effet stabilisant sur les grandes échelles de l'instabilité de Rayleigh-Taylor. Pour étudier le cas visqueux, on utilise le code de stabilité linéaire SPECLMD.

L'étude des modes normaux consiste à étudier la réponse d'un système à de petites perturbations. Le problème étant périodique dans les directions x et y, la perturbation est exprimée en série de Fourier dans les directions horizontales, sous la forme  $e^{i(k_x x + k_y y)}$ . La dépendance

verticale est écrite sous la forme  $e^{(\sigma+i\omega)t}$  car l'état de base est indépendant du temps. Pour l'instabilité de Rayleigh-Taylor, on trouve systématiquement  $\omega = 0$  (Le Creurer, 2005). L'enjeu du calcul est de déterminer  $\sigma$  en fonction du couple  $(k_x, k_y)$ . La linéarisation des équations de Navier-Stokes conduit à un problème matriciel dont la résolution fournit les modes propres et vecteurs propres. On obtient in fine la relation de dispersion  $\sigma = f(k_x, k_y)$ .



FIGURE 6.1 – Courbe de dispersion  $\sigma = f(k)$ , avec  $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ . Les deux modes instables sont représentés, pour les états initiaux correspondant aux simulations A5-Sr2 et A5-Sr04. La résolution en modes normaux s'appuie sur les équations compressibles et non les équations anélastiques. Le mode le plus instable est le premier mode, en bleu pour l'état initial A5-Sr2 et en rose pour l'état initial A5-Sr04. L'existence du deuxième mode instable est liée aux raccords des profils de masse volumique et de concentration, il est d'autant plus négligeable que  $\delta$  est faible. En rouge, deuxième mode A5-Sr2 et en vert, deuxième mode A5-Sr04.

Le code SPECLMD calcule cette relation de dispersion pour une situation Ravleigh-Taylor stratifiée et pour les équations compressibles linéarisées. Ainsi, pour étudier la stabilité linéaire d'une configuration de Boussinesq, il est nécessaire de choisir des valeurs limites pour la stratification  $(Sr \to 0)$ , les coefficients adiabatiques  $(\gamma \to \infty)$  et le nombre de Prandtl  $(Pr \to \infty)$ 0). Cette situation pose des problèmes numériques lorsque les coefficients sont trop grands ou trop proches de 0. La relation de dispersion obtenue contient donc une marge d'erreur.

Dans le cas anélastique, la situation est plus complexe. Le modèle anélastique contient le même nombre de paramètres physiques que le modèle compressible, c'est-à-dire qu'on ne peut pas l'approcher en imposant une valeur limite à un paramètre. Le code SPECLMD est donc paramétré avec la condition initiale anélastique souhaitée (en termes de profil de masse volumique), mais on obtient la stabilité du système dirigée par les équations compressibles, et non celle guidée par les équations anélastiques. On espère que l'écart reste faible. La figure 6.1 montre la courbe de dispersion pour les deux premiers modes instables des systèmes constitués par les états initiaux des simulations A5-Sr2 et A5-Sr04 et gouvernés par les équations compressibles. On observe que l'initialisation  $k \in [150.8; 182.2]$  correspond pratiquement au

maximum d'instabilité pour le premier mode. En outre, le passage de Sr = 0.4 à S = 2 (accroissement de la compressibilité) a un effet stabilisant extrêmement faible.

#### 6.1.3 Croissance linéaire et non linéaire

Cette section présente quelques résultats sur le comportement des simulations A25-Sr2, A5-Sr2 et A5-Sr04.



FIGURE 6.2 – Gauche : demi-largeurs des couches de mélange en fonction du temps. Droite : évolution temporelle du maximal spatial du paramètre de compressibilité  $\gamma Ma^2$ . La ligne pointillée est 0.15, une limite estimée de validité du modèle anélastique. Elle correspond à Ma = 0.3 lorsque  $\gamma = 5/3$ .

La figure 6.2 (gauche) présente l'évolution de la demi-épaisseur du défaut. On ne parle pas de demi-épaisseur de couche de mélange puisque celle-ci n'est pas formée aux instants finaux atteints par ces simulations. La croissance de la simulation A25-Sr2 est la plus lente des trois, ce qui est relié à son nombre d'Atwood qui le plus faible. Un autre constat peut être fait : le développement de la simulation A5-Sr04 est bien plus rapide que celui de la simulation A5-Sr2. Le seul paramètre différent entre ces deux simulations est le paramètre de stratification Sr. Il semble surprenant qu'il ait une telle influence étant donné les résultats de l'analyse linéaire. L'évolution du maximum spatial (x, y, z) du paramètre de compressibilité  $\gamma$ Ma<sup>2</sup> est visible sur la figure 6.2, droite. Dans le cadre du modèle anélastique, le nombre de Mach est calculé de la façon suivante :

$$Ma = \frac{(u_i u_i)^{1/2}}{c_s^{(0)}} \qquad \text{avec} \qquad c_s^{(0)} = \left(\gamma \frac{p^{(0)}}{\rho^{(0)}}\right)^{1/2}.$$
 (6.1)

La croissance du paramètre  $\gamma Ma^2$  est la plus rapide pour la simulation A5-Sr04. Les deux autres simulations, A5-Sr2 et A25-Sr2, présentent un délai avant le début de la croissance de ce paramètre. Lorsque celle-ci commence, elle se fait à un rythme bien supérieur à celui observé pour la simulation A5-Sr04.

L'évolution temporelle de l'énergie cinétique totale  $E_c = \frac{1}{2}u_i u_i$ , de la vorticité  $\langle \overline{\omega_i \omega_i} \rangle^{1/2}$  et du terme de production barocline de l'équation de vorticité anélastique (2.94) sont montrées pour les trois simulations sur les figures 6.3 (gauche) et 6.4 (gauche et droite). Ces trois quantités ont un comportement similaire. Au début des simulations, ces quantités restent





FIGURE 6.3 – Gauche : énergie cinétique totale  $E_c = \frac{1}{2}u_iu_i$  en fonction du temps. Droite : composante  $b_{33}$  du tenseur d'anisotropie.



FIGURE 6.4 – Gauche : vorticité  $\langle \overline{\omega_i \omega_i} \rangle^{1/2}$  en fonction du temps. Droite : terme de production barocline de l'équation de vorticité (2.94) en fonction du temps.

constantes ou décroissent légèrement, conséquence de la diffusion de la perturbation de vitesse, extrêmement localisée à t = 0. Il s'ensuit une croissance rapide et forte pour la simulation A5-Sr04. La simulation A5-Sr2 a un comportement différent. Dans un premier temps, une croissance faible s'enclenche (t = 0.5) puis s'inverse (t = 1). Un peu après, un régime de croissance forte s'enclenche (t = 4). La simulation A25-Sr2 présente plus ou moins le même phénomène, avec un délai plus long mais pas de décroissance après la phase initiale de diffusion. L'énergie cinétique totale, la vorticité et le terme de production barocline de l'équation de vorticité des simulation A5-Sr2 et A25-Sr2 augmentent au même rythme après t = 4, et plus rapidement que la simulation A5-Sr04 qui a pourtant un nombre d'Atwood plus élevé que la simulation A25-Sr2.

La chronométrie de la simulation A5-Sr04 est beaucoup plus rapide que celle des deux autres simulations. L'évolution de l'anisotropie  $b_{33}$  en fonction du temps (figure 6.3, droite) est conforme à cette observation. Le seul paramètre qui diffère entre les simulations A5-Sr2 et A5-Sr04 est la stratification. Celle-ci intervient à deux niveaux. Lors du développement de l'instabilité, à moyen terme les structures de fluide lourd rencontrent du fluide léger qui devient de plus en plus dense et ralentit la croissance (et inversement pour les structures de fluide léger). Le paramètre Sr intervient également directement dans l'équation de mouvement, devant le terme de gradient de pression. Pour un champ de vitesse donné, plus le paramètre Srest grand, plus le gradient de pression est raide. Autrement formulé, une forte stratification augmente les effets de compressibilité qui relient vitesse, masse volumique et pression. Il apparaît cependant étonnant que passer de Sr = 0.4 à Sr = 2 ralentisse autant la croissance, compte tenu notamment des résultats obtenus lors des simulations compressibles (Gauthier, 2013).



FIGURE 6.5 – Simulation A5-Sr04 - isosurface c = 0.5 coloriée par la norme de la vitesse (échelles de couleurs variables). Vue depuis le bas du domaine. Instants t = 0.1, t = 0.2, t = 0.5, et t = 0.8.

Ces écarts ont motivé l'observation à différents instants des interfaces c = 0.5 entre les fluides lourd et léger, pour la simulation A5-Sr04 (à croissance rapide) et la simulation A5-Sr2 qui est une des deux simulations dont la croissance présente un délai. Ces images sont regroupées sur les figure 6.5 et 6.6. Les petites échelles constituant la perturbation initiale en vitesse croissent de manière continue pour la simulation A5-Sr04. Pour la simulation A5-Sr2 en revanche, ces perturbations sont noyées à moyen terme par des longueurs d'onde plus grandes. La situation est la même pour la simulation A25-Sr2 (images non montrées).



FIGURE 6.6 – Simulation A5-Sr2 - isosurface c = 0.5 coloriée par la norme de la vitesse (échelles de couleurs variables). Vue depuis le bas du domaine. Instants t = 0.1, t = 0.2, t = 2, t = 3.5, t = 4.2 et t = 5.

L'initialisation utilisée fait partie des nombres d'onde instables pour la simulation A5-Sr04 mais sont quasiment stables pour les simulations A5-Sr2 et A25-Sr2. Le mode dominant apparaît à  $t \approx 6$  pour la simulation A25-Sr2 et  $t \approx 4$  pour la simulation A5-Sr2. Cela correspond au démarrage d'une croissance forte de l'énergie cinétique et de la vorticité dans les deux cas.

Le calcul des spectres de vitesse verticale  $u_z$  aboutit à une conclusion similaire (figure 6.7). On relève trois intervalles dominants de longueurs d'onde :

- [75; 107]. C'est le mode à grandes longueurs d'onde observé sur les isosurfaces des simulations A5-Sr2 et A25-Sr2. Il est dominant sur ces deux simulations et légèrement dominé dans le cas A5-Sr04,
- [151; 182]. C'est la perturbation initiale. Cet intervalle est dominant dans le cas A5-Sr04, légèrement dominé dans le cas A25-Sr2 et sensiblement dominé dans le cas A5-Sr2,
- [264; 314]. Ces nombres d'onde sont présents dès le tout début des trois simulations et croissent à la même vitesse que la perturbation initiale. Cet intervalle est décalé d'un facteur 1.7 environ par rapport à l'intervalle des perturbations initiales.

Ces résultats contrastent avec l'analyse linéaire effectuée en section 6.1.2. Il apparaît que les systèmes constitués des états initiaux A5-Sr2 et A5-Sr04 pilotés par les équations anélastiques se comportent différemment des systèmes constitués des mêmes états initiaux mais dirigés par les équations compressibles. En particulier, la stratification a une influence très forte sur la relation de dispersion en anélastique alors que l'effet est faible en compressible. Les modes  $k \in [150.8; 182.2]$  ne sont pas instables pour le système anélastique A5-Sr2 alors qu'ils le sont pour le même état initial piloté par les équations compressibles. Il semble donc que le modèle anélastique surestime la stabilisation induite par la stratification pour les petites échelles. On



FIGURE 6.7 – Spectres Fourier de la composante de vitesse verticale  $u_z$  pour les simulations A25-Sr2 (haut), A5-Sr2 (gauche) et A5-Sr04 (droite). Les pointillés noirs représentent l'intervalle de nombres d'onde de la perturbation initiale.

ne dispose pas de la résolution du problème linéaire anélastique dans le code SPECLMD. La développer permettrait de mesurer précisément les écarts entre les courbes de dispersion pour les modèle anélastique et compressible.

La comparaison entre les simulations A5-Sr2 et A5-Sr04 (variation du paramètre de stratification) est rendue périlleuse en raison des différences de chronométrie et du mode dominant qui croît. En revanche, la comparaison entre les simulations A25-Sr2 et A5-Sr2 devrait être possible.

#### 6.1.4 Visualisations des états finaux atteints

Les états finaux atteints par ces trois simulations sont présentés dans cette section sur la figure 6.8. Ces simulations étant dédiées à l'étude des premières phases de l'instabilité de Rayleigh-Taylor, les couches de mélange ne sont pas formées et ne sont pas le but de l'étude. On fait le choix de visualiser l'isosurface de concentration c = 0.5 qui, avant la transition en couche de mélange, est une bonne représentation des structures (champignons, bulles ou aiguilles) formées par l'écoulement. Les isosurfaces sont coloriées par le champ de température. On observe que la simulation A5-Sr04 est moins avancée que les deux autres : les structures sont bien alignées et les champignons non encore formés. On retrouve le constat précédent :



FIGURE 6.8 – États finaux atteints par la simulation A25-Sr2 (t = 9.5, haut), A5-Sr2 (t = 7.5, gauche) et A5-Sr04 (t = 2.1, droite). Chaque cas est composé de deux images (vue d'en haut et vue d'en bas). L'isosurface de concentration c = 0.5 est coloriée par la température.

les structures des simulations à Sr = 2 sont plus larges (horizontalement) que les structures à Sr = 0.4. Le fluide lourd qui s'enfonce dans le fluide léger s'échauffe tandis que le fluide léger qui monte dans le fluide lourd se refroidit.

L'asymétrie entre bulles et aiguilles est bien visible pour les simulations A25-Sr2 et A5-Sr2. La simulation A5-Sr04 n'est pas assez avancée et l'asymétrie n'est pas encore visible. Les effets de température semblent plus importants dans les simulations à At = 0.5 que dans la simulation à At = 0.25.



FIGURE 6.9 – Simulation A25-Sr2. Gauche : profils moyennés de fluctuations de température  $\overline{T'^2}^{1/2}$ . Droite : profils moyennés de divergence de vitesse  $\overline{(\partial_i u_i)^2}^{1/2} = |\mathcal{S}| \overline{u_3^2}^{1/2}$ .

# 6.1.5 Analyses complémentaires : température, divergence et nombre de Mach

On utilise ici deux outils supplémentaires : les profils (z, t) obtenus par moyenne horizontale (x, y) des quantités complètes ; et les densités de probabilité. La moyenne (x, y) est classiquement utilisée pour l'étude des écoulements turbulents homogènes dans ces deux directions. On l'utilise d'ailleurs dans cette thèse pour caractériser les couches de mélange turbulentes issues de l'instabilité de Rayleigh-Taylor. Dans les écoulements Rayleigh-Taylor précoces comme ceux observés dans cette partie, un nombre important de structures est présent, sous la forme de doigts ou de champignons à des instants plus avancés. Ces motifs ont un caractère assez régulier, ce qui donne l'idée de moyenne horizontale pour leur étude.



FIGURE 6.10 – Simulation A5-Sr2. Gauche : profils moyennés de fluctuations de température  $\overline{T'^2}^{1/2}$ . Droite : profils moyennés de divergence de vitesse  $\overline{(\partial_i u_i)^2}^{1/2} = |\mathcal{S}| \overline{u_3^2}^{1/2}$ .

Les deux grandeurs observées sont :  $\overline{T'^2}^{1/2}$  et  $\overline{(\partial_i u_i)^2}^{1/2} = |\mathcal{S}| \overline{u_3^2}^{1/2}$  où l'opérateur — est la moyenne horizontale (x, y). Ces moyennes sont présentées sous forme de profils (z, t) sur

les figures 6.9, 6.10 et 6.11. Les axes des abscisses sont la direction verticale z, l'échelle est identique sur les six graphes présentés.



FIGURE 6.11 – Simulation A5-Sr04. Gauche : profils moyennés de fluctuations de température  $\overline{T'^2}^{1/2}$ . Droite : profils moyennés de divergence de vitesse  $\overline{(\partial_i u_i)^2}^{1/2} = |\mathcal{S}| \overline{u_3^2}^{1/2}$ .

Les simulations A25-Sr2 et A5-Sr2 ont un comportement similaire, avec un décalage en temps lié au nombre d'Atwood plus faible pour la simulation A25-Sr2 que pour la simulation A5-Sr2 qui se développe plus rapidement (voir section 6.1.3). Aux instants avancés, les effets de température et de compressibilité s'étendent assez amplement. Les zones de fluides qui font face aux structures en forme de champignon sont ainsi légèrement impactés par l'ascension (ou la plongée) de celles-ci. Sur ces deux simulations, on observe l'apparition d'effets d'asymétrie, les profils étant différents côté z < 0 et côté z > 0.

La simulation A5-Sr04 est moins développée à son instant final que les deux autres simulations. Les effets d'asymétrie ne sont pas visibles. La valeur maximale de la moyenne horizontale des fluctuations de température, située en z = 0, semble augmenter de moins en moins vite à mesure que les doigts s'agrandissent. Cet effet est également observable sur la simulation A5-Sr2, dans une moindre mesure.

La divergence du champ de vitesse peut être considérée comme l'inverse d'un temps caractéristique  $t_c$ , en effet  $\partial_i u_i = -\dot{\rho}/\rho$  en formalisme compressible. Ce temps peut être vu comme le temps de déformation du champ de masse volumique ou le temps caractéristique des phénomènes de compressibilité. Les valeurs mesurées de  $t_c$  sont de l'ordre de 10 pour les simulations A5-Sr2 et A25-Sr2, c'est-à-dire comparable au temps physique des simulations, arrêtées en raison des valeurs limites atteintes par le paramètre  $\gamma Ma^2$ . Pour la simulation A5-Sr04 en revanche,  $t_c \approx 30$ , ce qui est bien supérieur au temps de simulation pourtant elle aussi arrêtée en raison des valeurs du paramètre  $\gamma Ma^2$ .

Les densités de probabilités sont usuellement utilisées pour qualifier les écoulements turbulents. La grande quantité de tourbillons développent un effet statistique qu'il est logique d'étudier en calculant des densités de probabilité. Le raisonnement est similaire ici, en substituant les structures en forme de doigts (puis de champignons) aux tourbillons. Bien qu'en nombre plus faible, ces structures permettent de calculer des densités de probabilité qui sont reliées aux propriétés de l'écoulement. On s'intéresse préférentiellement aux grandeurs liées aux effets de compressibilité et de température.

La figure 6.12 présente les densités de probabilité des fluctuations de température, des



FIGURE 6.12 – Simulation A5-Sr2. Gauche : densité de probabilité de T'. Droite : densité de probabilité de  $\rho'$ . Bas : densité de probabilité du nombre de Mach, l'équation de la ligne en pointillés est  $P = Mach^{-1}$ .

fluctuations de masse volumique et de nombre de Mach pour la simulation A5-Sr2 à différents instants. Sur les deux premières, on observe l'apparition progressive d'asymétrie dans l'écoulement, les valeurs négatives de T' et les valeurs positives de  $\rho'$  étant surreprésentées. Les densités de probabilité de nombre de Mach montrent un comportement particulier. Les valeurs de nombre de Mach présentes dans l'écoulement se décalent vers les valeurs élevées à mesure de la croissance de l'instabilité. Ceci concerne à la fois la valeur la plus probable et la valeur maximale de nombre de Mach. La ligne en pointillés noirs  $P(Mach) = Mach^{-1}$  s'aligne assez bien avec les données. Elle signifie que la valeur de la probabilité du nombre de Mach le plus présent dans l'écoulement est proportionnelle à l'inverse de la valeur du nombre de Mach en question. Les probabilités d'apparition diminuent dans l'ensemble, mais le support de la densité de probabilité (c'est-à-dire la gamme de nombre de Mach sur laquelle elle est non nulle) s'élargit.

Les densités de probabilité de la simulation A25-Sr2 ressemblent à celle de la simulation A5-Sr2. Quant à la simulation A5-Sr04, on a constaté précédemment qu'elle n'a pas encore développé d'asymétrie à son instant d'arrêt t = 2.1 et on le retrouve sur les densités de probabilité (non montrées).

Les valeurs du paramètre de stratification utilisées pour les trois simulations, Sr = 0.4 et

Sr = 2, parcourent toute l'étendue du domaine de validité du modèle anélastique. Les nombres d'Atwood utilisés sont modérés. Ces trois simulations ont du être stoppées relativement tôt dans leur développement, en raison de phénomènes compressibilité non négligeables. Ils se traduisent par des valeurs du nombre de Mach entraînant l'invalidité du modèle anélastique.

### 6.2 Couche de mélange turbulente anélastique

Cette section est dédiée à l'étude de la simulation A01-Sr04. Les paramètres physiques de cette simulation sont regroupés dans le tableau 6.1. Ils sont partiellement communs avec les paramètres de la simulation A01-Sr0 analysée au chapitre 5 (voir tableau 5.1). Les faibles valeurs du nombre d'Atwood et du paramètre de stratification permettent au nombre de Mach de croître de façon maîtrisée, et donc d'autoriser la simulation à aller jusqu'à la phase de couche de mélange.

Il est malaisé de trouver des comparaisons dans la littérature pour les simulations anélastiques. Il existe des simulations à fortes valeurs des paramètres de stratification Sr qui dépassent en général les valeurs admissibles pour le modèle anélastique. Gauthier (2013) s'intéresse au phénomène de saturation de la croissance de la couche de mélange, induite par la stratification (voir section 1.1.1). George & Glimm (2005) se focalisent sur la phase de croissance de l'instabilité, et tentent de retrouver les lois d'échelle du cas non-stratifié en définissant un nombre d'Atwood dépendant du temps. Quant aux expériences, il est impossible de reproduire des configurations très stratifiées dans un laboratoire. Lawrie & Dalziel (2011) parviennent à l'imiter, mais la stratification n'a plus pour origine la compression des fluides sous l'effet de la gravité. Elle vient d'un gradient de concentration en sel dans une couche d'eau. Si le profil de masse volumique et la compressibilité statique ressemblent à ce qui nous intéresse dans les simulations anélastiques, la physique est assez différente. Les effets de compressibilité dynamique ne sont pas du tout les mêmes dans une couche de gaz stratifiée sous l'effet de la gravité et dans une couche d'eau salée de concentration variable. On parle dans ce cas de masse volumique variable mais pas de compressibilité.

Les écoulements turbulents en stratification stable sont légion. Ivey *et al.* (2008) font un état des lieux de l'étude du mélange dans les configurations stratifiées. Cependant, les situations évoquées sont éloignées de la configuration Rayleigh-Taylor telle qu'on l'étudie dans cette thèse. La présente simulation anélastique est donc comparée aux simulations analysées précédemment, dans ce chapitre ou dans le chapitre 5. Des visualisations de l'état final atteint lors de la simulation sont visibles dans la section 4.2.3.2. La couche de mélange est moins épaisse que celle formée dans la simulation A01-Sr0.

Un résultat important doit être mentionné ici. Le phénomène de saturation de la couche de mélange, évoqué en section 1.1.1, est mal capturé par le modèle anélastique. Des simulations en deux dimensions montrent bien le ralentissement de la croissance de différentes quantités (vorticité, énergie cinétique) lié à la stratification, mais pas de saturation. Après un temps de ralentissement, la croissance reprend, portée par des germes situés légèrement au-delà des frontières de la couche de mélange. Le terme de flottabilité de l'équation de la quantité de mouvement anélastique, qui devrait être nul, ne l'est pas. Une hypothèse est que cela viendrait du terme de concentration. En effet la concentration varie entre 0 et 1. La concentration finale utilisée pour l'état de base (0) prend des valeurs autour de 0.5 et la perturbation  $c^{(1)}$  n'est donc pas négligeable devant  $c^{(0)}$  dans tout l'espace.


#### 6.2.1 Généralités

FIGURE 6.13 – Gauche : évolution temporelle des demi-épaisseurs de la couche de mélange  $h_b$  (côté bulles) et  $h_s$  (côté aiguilles). La loi d'échelle en  $t^2$ , valide pour les couches de mélange en approximation de Boussinesq, est représentée. Droite : profils de masse volumique moyennée horizontalement  $\overline{\rho}$  à différents instants.

Les premiers résultats présentés concernent l'évolution des demi-épaisseurs supérieure  $h_b$ et inférieure  $h_s$  de la couche de mélange (figure 6.13, gauche). Dans le cas des simulations en approximation de Boussinesq, les deux côtés de la couche de mélange sont statistiquement identiques. Cela est un phénomène vérifié expérimentalement lorsque  $At \ll 1$  (Mueschke *et al.*, 2009). La valeur du nombre d'Atwood At = 0.1 est à la frontière de ce critère. En conséquence, on observe une légère différence de pénétration pour les deux côtés de la couche de mélange. Cette différence n'apparaît qu'après la transition à la turbulence. La loi d'échelle  $h = t^2$ , valide aux temps longs pour les couches de mélange de Boussinesq en croissance auto-semblable, est également représentée. La croissance des demi-épaisseurs de la simulation anélastique est plus rapide que cette loi. La raison est le faible avancement de la simulation. Rappelons que la simulation A01-Sr0 en approximation de Boussinesq présente également une phase de croissance plus rapide que  $h = t^2$ , après la transition à la turbulence mais avant l'établissement de régime de croissance auto-semblable (voir figure 5.1, milieu). Cette période correspond à la phase de chute libre décrite en section 5.1. Les têtes des structures en forme de champignons progressent rapidement, les vitesses de l'écoulement sont majoritairement verticales. Les colonnes de fluides situées derrière les champignons sont stables et alimentent suffisamment les champignons. Lorsque ces colonnes se déstabilisent, on assiste à la formation d'une turbulence tridimensionnelle au niveau du plan médian z = 0, c'est la couche de mélange. Le mélange est le plus efficace à cette période car profite de l'énergie cinétique accumulée pendant la phase de chute libre. La couche de mélange formée dans la simulation A01-Sr04 est précoce, ceci explique la forte vitesse de croissance des demi-épaisseurs. La suite serait la formation d'une couche de mélange turbulente épaisse, non auto-semblable en raison de la stratification, puis le fort ralentissement de la croissance en raison de la stratification.

Le graphe de droite de la figure 6.13 montre les profils de masse volumique moyennée horizontalement. Le saut de masse volumique est petit à petit effacé à mesure que la couche de mélange s'épaissit. La turbulence ne passe pas en déclin dès que la masse volumique moyenne est constante dans la couche de mélange. On observe encore localement des zones de flottabilité non-nulle. En conséquence, de l'énergie potentielle continue pendant un temps à être relâchée dans l'écoulement. On verra que le terme barocline de l'équation d'enstrophie n'a pas encore commencé à décroître à t = 15 (figure 6.31), alors que la masse volumique moyennée est presque constante.



FIGURE 6.14 – Gauche : évolution temporelle des longueurs caractéristiques de l'écoulement : Épaisseur totale de la couche de mélange, échelle intégrale, échelles de Taylor de vitesse x et z, échelles Taylor de mélange x et z, échelle de Kolmogorov. Droite : mêmes longueurs, mais compensées par les lois d'échelles valides pour les couches de mélange en approximation de Boussinesq. Les longueurs sont calculées par la moyenne  $\beta = 0.2$  selon l'équation (5.2).

La figure 6.14 présente l'évolution des grandeurs caractéristiques de l'écoulement :

- épaisseur de la zone de mélange,  $\mathcal{L} = h_b + h_s$ ;
- longueur intégrale,  $\ell = \langle \overline{k}_B^{3/2} / \overline{\varepsilon} \rangle_{\beta};$
- échelle horizontale de Taylor de vitesse,  $\lambda_{xx}^2 = \langle \overline{u_x'^2} / (\overline{\partial_x u_x'})^2 \rangle_\beta$ ; échelle verticale de Taylor de vitesse,  $\lambda_{zz}^2 = \langle \overline{u_z'^2} / (\overline{\partial_z u_x'})^2 \rangle_\beta$ ; échelle de Kolmogorov,  $\lambda_K = (Re^3 \langle \overline{\varepsilon} \rangle_\beta)^{-1/4}$ ;
- échelle horizontale de Taylor de mélange,  $\lambda_{c\,xy}^2 = 2 \left\langle \overline{c'^2} / (\overline{(\partial_x c')^2} + \overline{(\partial_y c')^2}) \right\rangle_\beta$ ;
- échelle verticale de Taylor de mélange,  $\lambda_{cz}^2 = \langle \overline{c'^2} / \overline{(\partial_z c')^2} \rangle_{\beta}$ ,

Les moyennes  $\beta$  sont calculées par l'équation (5.2). Sur la droite, ces mêmes longueurs sont tracées avec compensation par la loi d'échelle des couches de mélange en approximation de Boussinesq. Comme évoqué précédemment, l'épaisseur de la couche de mélange de la simulation anélastique A01-Sr04 croît plus vite que  $t^2$ . La longueur intégrale respecte mieux cette loi d'échelle. Les échelles de Taylor horizontales de vitesse et de concentration évoluent à peu près comme la loi d'échelle de Boussinesq. En revanche, les échelles de Taylor verticales de vitesse et de mélange augmentent moins vite. Cela peut venir de la stratification : l'effet est d'abord ressenti sur l'écoulement vertical. Quant à l'échelle de Kolmogorov, seule longueur de cette liste dont la loi d'échelle est décroissante en fonction du temps, elle décroit rapidement mais approche la loi d'échelle de Boussinesq vers la fin de la simulation.

Comme pour l'étude de la couche de mélange en approximation de Boussinesq, le nombre de Reynolds basé sur la micro-échelle de Taylor est calculé dans la direction horizontale et dans la direction verticale

$$Re_{Tx} = Re \lambda_{xx} \left(2\,\overline{k}\right)^{1/2}$$
 et  $Re_{Tz} = Re \lambda_{zz} \left(2\,\overline{k}\right)^{1/2}$ , (6.2)

où les opérateurs de moyenne  $\langle \rangle_{\beta}$  apparaissant dans les expressions de  $\lambda_{xx}^2$  et  $\lambda_{zz}^2$  sont supprimées. Les nombres de Reynolds de Taylor obtenus dépendent donc de z et de t. Ils augmentent à mesure que la couche de mélange se développe et sont plus élevés au centre de la couche de mélange qu'aux frontières, non turbulentes. À l'instant final de la simulation A01-Sr04, on a  $Re_{Tx} \approx 64$  et  $Re_{Tz} \approx 117$ . Ils sont moins élevés que pour la simulation A01-Sr0.



FIGURE 6.15 – Gauche : Temps de retournement des tourbillons  $\langle \overline{k}_B/\overline{\varepsilon} \rangle_{\beta}$  en fonction du temps pour deux valeurs de  $\beta$  : 0.2 (centre de la couche de mélange) et 0.8 (majorité de la couche de mélange). Droite : Nombre de Reynolds externe  $Re_h$  calculé de deux façons différentes. 1) avec  $h_{seuil}$  à 5% et 95% 2) avec  $h_{integrale} = 3\langle \overline{c}(1-\overline{c}) \rangle$ .

La figure 6.15 (gauche) présente le temps de retournement des tourbillons dans la couche de mélange, calculé par l'expression  $\langle \overline{k}_B/\overline{z} \rangle_{\beta}$ . Pendant la majorité de la simulation, ce temps est légèrement plus élevé dans le centre de la couche, où la turbulence est plus intense. Le temps de retournement semble homogène dans la couche à l'instant final de la simulation. On remarque aussi que ce temps reste pratiquement constant après la transition à la turbulence. Comparé à la simulation A01-Sr0 (figure 5.2, droite), ce caractère constant est une différence. Il semble que la stratification ralentisse suffisamment l'intensification de la turbulence pour que l'épaississement de la couche de mélange turbulente se fasse à temps constant de retournement des tourbillons. La figure 6.15 (droite) montre l'évolution temporelle du nombre de Reynolds externe  $Re_h = 4 \operatorname{Re} h \dot{h}$ , la demi-épaisseur h étant telle que  $2h = h_s + h_b$ . Le calcul des demi-épaisseurs est réalisé de deux façons. La première par intégration :

$$h_{s} = \int_{z} 3\,\overline{c}(1-\overline{c})\,\mathbf{1}_{[z_{b};0]}\,dz \quad \text{et} \quad h_{b} = \int_{z} 3\,\overline{c}(1-\overline{c})\,\mathbf{1}_{[0;z_{t}]}\,dz. \tag{6.3}$$

La deuxième méthode fonctionne par seuil à 5% et 95% et est basée sur la grandeur  $\bar{c}(z)$ . Les cotes en lesquelles celle-ci atteint 0.05 et 0.95 sont les frontières de la couche de mélange. Les demi-épaisseurs sont calculées en considérant que le plan z = 0 sépare les parties supérieure et inférieure de la couche. D'une manière générale, la méthode par intégration fournit un résultat plus lisse, la deuxième étant très sensible à l'irrégularité des frontières dans les directions horizontales. On remarque que les nombres de Reynolds externes  $Re_h$  calculés en s'appuyant sur ces deux méthodes pour  $h_s$  et  $h_b$  se comportent légèrement différemment. Le nombre de Reynolds basé sur les seuils atteint un palier à t = 13, tandis que celui calculé par intégration ralentit mais reste faiblement croissant. Cela est dû à la présence d'une structure échappée de

la couche de mélange du côté des bulles (voir figure 4.25, droite). Cette structure est la plus soumise au ralentissement lié à la stratification en raison de cette avance. La méthode par intégration tient moins compte de cette structure que la méthode par seuil dans le calcul des demi-épaisseurs, et davantage de toutes les autres structures qui rattrapent leur retard. Le Reynolds externe basé sur la méthode par intégration continue donc à augmenter légèrement, ce qui est plus proche de la réalité de l'évolution de la couche de mélange.

### 6.2.2 Vitesse, pression, énergie cinétique et dissipation



FIGURE 6.16 – Gauche : évolution temporelle de la moyenne  $\beta = 0.2$  de l'énergie cinétique turbulente k et de ses composantes x et z. La loi d'échelle en  $t^2$ , valide pour les couches de mélange en approximation de Boussinesq, est représentée. Droite : Spectre compensé par  $k^{-5/3}$  de  $u'_z$ . La zone inertielle est rendue visible par les pointillés noirs.

La figure 6.16 montre l'évolution des composantes de l'énergie cinétique turbulente dans le cœur de la couche de mélange (moyenne  $\beta = 0.2$ ). La formation des champignons provoque une accélération de l'augmentation de k vers  $t \approx 8$ . La composante horizontale reste longtemps marginale, ce qui est le signe que la formation de la couche de mélange est inachevée dans cette simulation. La loi d'échelle en  $t^2$  de la couche de mélange en approximation de Boussinesq est représentée. La phase de chute libre correspond à une croissance plus rapide (même en anélastique) que l'état de croissance auto-semblable de Boussinesq. À long terme, le ralentissement induit par la stratification provoque certainement une croissance anélastique moins rapide que le cas non stratifié de Boussinesq. Entre les deux, on doit donc observer un ralentissement progressif d'abord dû à la fin de la chute libre puis à la stratification. On l'observe bien ici.

Le graphe de droite représente le spectre des fluctuations de vitesse verticale  $u'_z$ , compensé par  $k^{-5/3}$ . Une zone inertielle apparaît sur une petite décade et s'élargit avec le temps. À l'instant final de la simulation A01-Sr04, la stratification ralentit la croissance mais ne provoque pas le déclin de la turbulence.

Les figures 6.17 et 6.18 présentent respectivement les coefficients de dissymétrie (skewness) et d'aplatissement (flatness) pour les fluctuations des composantes de vitesse  $(u'_x \text{ et } u'_z)$ . Contrairement à l'étude de la couche de mélange de Boussinesq au chapitre 5, ces quantités sont tracées ici en fonction de z et non de z/h en raison de l'absence de croissance auto-semblable dans le cas anélastique. Le développement de la couche de mélange s'accompagne



FIGURE 6.17 – Coefficients de dissymétrie (skewness) des fluctuations de composantes de vitesse. Gauche : composante horizontale  $\overline{u_x'^3}/\overline{u_x'^2}^{3/2}$ . Droite : composante verticale  $\overline{u_z'^3}/\overline{u_z'^2}^{3/2}$ .

de valeurs de plus en plus faibles des coefficients de dissymétrie. Les densités de probabilité de  $u'_x$  et  $u'_z$  sont donc théoriquement symétriques. Le profil z du coefficient de dissymétrie est plus régulier dans le cas de la composante verticale que dans le cas de la composante horizontale. Cela renvoie à une turbulence mieux établie dans la direction verticale que dans la direction horizontale. Cela est cohérent avec le fait que l'énergie est injectée dans la direction verticale (par la gravité).



FIGURE 6.18 – Coefficient d'aplatissement (flatness) des fluctuations de composantes de vitesse. Gauche : composante horizontale  $\overline{u_x'^4}/\overline{u_x'^2}^2$ . Droite : composante verticale  $\overline{u_z'^4}/\overline{u_z'^2}^2$ . Le coefficient d'aplatissement d'un processus gaussien est représenté par la ligne pointillée noire.

Le coefficient d'aplatissement de la fluctuation de vitesse horizontale vaut zéro au cœur de la couche de mélange. La densité de probabilité de  $u'_x$  est donc théoriquement très proche d'une gaussienne. Quant à la composante verticale, le coefficient d'aplatissement est plus faible que la valeur de la gaussienne.

Toutes les densités de probabilité de ce chapitre sont présentées par deux graphes. Le premier s'intéresse à l'instant final de la simulation A01-Sr04 (t = 15) et à trois espaces de



FIGURE 6.19 – Densités de probabilité des fluctuations de vitesse horizontale  $u'_x$ . Gauche : calcul à l'instant t = 15, sur trois espaces différents,  $0.2 < \overline{c} < 0.5$ ,  $0.5 < \overline{c} < 0.8$  et  $0.2 < \overline{c} < 0.8$ . Droite : calcul pour les deux instants t = 13 et t = 15 sur l'espace  $0.2 < \overline{c} < 0.8$ . La gaussienne la plus proche de la densité de probabilité à t = 15 est représentée.

calcul de la densité de probabilité : partie inférieure de la couche de mélange  $(0.2 < \overline{c} < 0.5)$ , partie supérieure de la couche de mélange  $(0.5 < \overline{c} < 0.8)$  et majorité de la couche de mélange  $(0.2 < \overline{c} < 0.8)$ . Les densités de probabilité du deuxième graphe utilisent la majorité de la couche de mélange  $(0.2 < \overline{c} < 0.8)$  à deux dates différentes. La gaussienne la plus proche de la densité de probabilité à t = 15, c'est-à-dire qui partage moyenne et variance, est tracée en pointillés. Les densités de probabilité de la fluctuation de vitesse horizontale  $u'_x$  sont tracées sur la figure 6.19. Comme prévu par les coefficients de dissymétrie et d'aplatissement, ces densités de probabilité sont très proches de gaussiennes. La figure 6.20 présente les densités



FIGURE 6.20 – Densités de probabilité des fluctuations de vitesse verticale  $u'_z$ . Gauche : calcul à l'instant t = 15, sur trois espaces différents,  $0.2 < \overline{c} < 0.5$ ,  $0.5 < \overline{c} < 0.8$  et  $0.2 < \overline{c} < 0.8$ . Droite : calcul pour les deux instants t = 13 et t = 15 sur l'espace  $0.2 < \overline{c} < 0.8$ . La gaussienne la plus proche de la densité de probabilité à t = 15 est représentée.

de probabilité de la fluctuation de vitesse verticale  $u'_z$ . Contrairement à la composante horizontale, elles présentent des écarts au comportement gaussien. Les calculs sur les moitiés inférieure ou supérieure de la couche de mélange montrent des différences, avec une surreprésentation des valeurs faiblement positives dans la moitié inférieure et une surreprésentation des valeurs faiblement négatives dans la moitié supérieure. La comparaison des densités de probabilité à t = 13 et t = 15 montre que l'écart à la gaussienne s'atténue avec le temps. L'intervalle  $\bar{c} \in [0.2; 0.8]$  exclut normalement les structures des frontières de la couche de mélange. Cependant, étant donnée la forte hétérogénéité spatiale (x, y) de celles-ci dans la simulation A01-Sr04 (voir figures 4.25 et 6.45), il est possible que le calcul des densités de probabilité inclue une partie des frontières. L'écart au caractère gaussien des densités de probabilité de  $u'_z$  peut être dû à cette inclusion de zones non turbulentes dans le calcul.



FIGURE 6.21 – Anisotropie  $b_{33}$ . Gauche : nappe (z, t). Droite : évolution temporelle des moyennes  $\beta$ .

L'anisotropie est étudiée au moyen des mêmes quantités que la simulation A01-Sr0 du chapitre 5. Aux grandes échelles, l'anisotropie d'un écoulement est classiquement mesurée par le tenseur d'anisotropie des contraintes de Reynolds

$$\overline{b}_{ij} = \frac{\overline{u'_i u'_j}}{2 \,\overline{k}_B} - \frac{1}{3} \,\delta_{ij}. \tag{6.4}$$

On peut généraliser la définition de la quantité  $b_{33}$  en dérivant (par rapport à x ou à z) l'ensemble des termes :

$$B_{\partial_k^{(d)} u_z'} = \left\langle \frac{(\partial_k^{(d)} u_z')^2}{\partial_k^{(d)} u_i' \partial_k^{(d)} u_i'} \right\rangle_\beta - \frac{1}{3}.$$
 (6.5)

La sommation est faite sur l'indice *i* mais pas sur k = x, z. On accède avec ces quantités à des informations sur l'anisotropie aux échelles intermédiaires (d = 1) et aux petites échelles (d = 2). Enfin, une autre forme d'anisotropie peut être formée en considérant le rapport de la dérivée par rapport à z d'une quantité sur la somme des dérivées par rapport à x, y et z:

$$C_{\partial_{z}^{(d)}u_{i}'} = \left\langle \frac{(\partial_{z}^{(d)}u_{i}')^{2}}{\left|\nabla^{(d)}u_{i}'\right|^{2}}\right\rangle_{\beta} - \frac{1}{3}.$$
(6.6)

Il n'y a pas de sommation sur l'indice *i*. L'anisotropie aux grandes échelles  $b_{33}$  est présentée sur la figure 6.21. Elle est forte ( $\approx 0.5$ ) aux frontières de la couche de mélange, et modérée



FIGURE 6.22 – Gauche : anisotropie des échelles intermédiaires  $B_{\partial_x^{(1)}u'_z}$  (bleu) et anisotropie des petites échelles  $B_{\partial_x^{(2)}u'_z}$  (rouge). Droite : anisotropie des échelles intermédiaires  $B_{\partial_z^{(1)}u'_z}$  (bleu) et anisotropie des petites échelles  $B_{\partial_z^{(2)}u'_z}$  (rouge). Le paramètre de la moyenne verticale est  $\beta = 0.2$ .

à l'intérieur ( $\approx 0.25$ ). Plus la turbulence se développe, plus l'anisotropie  $\langle b_{33} \rangle_{\beta}$  diminue. À l'instant final de la simulation, elle n'est pas convergée. Les anisotropies de type *B* (équation (6.5)) sont présentées sur la figure 6.22 et sont en diminution constante dès la transition à la turbulence. À t = 15, elles sont comprises entre -0.1 et 0. Les échelles intermédiaires et les petites échelles sont donc faiblement anisotropes. Les anisotropies définies par l'équation (6.6)



FIGURE 6.23 – Gauche : anisotropies des échelles intermédiaires  $C_{\partial_z^{(1)}u'_x}$  (bleu) et  $C_{\partial_z^{(1)}u'_z}$  (rouge). Droite : anisotropies des petites échelles  $C_{\partial_z^{(2)}u'_x}$  (bleu) et  $C_{\partial_z^{(2)}u'_z}$  (rouge). Le paramètre de la moyenne verticale est  $\beta = 0.2$ .

sont tracées sur la figure 6.23. Ce type d'anisotropie peut aussi être calculé en remplaçant les composantes de vitesse par le champ de concentration (voir section 6.2.3). Ces quantités C sont mieux convergées que les anisotropies B. Les résultats sont proches de ceux obtenus pour la couche de mélange de Boussinesq. On constate que  $C_{\partial_z^{(1)}u'_x}$  et  $C_{\partial_z^{(2)}u'_x}$  convergent vers 0 tandis que  $C_{\partial_z^{(1)}u'_z} \approx -0.2$  (en augmentation légère) et  $C_{\partial_z^{(2)}u'_z} \approx -0.26$ . Cela signifie que les

fluctuations de vitesse horizontale sont presque isotropes par rapport au gradient vertical. En revanche, la composante verticale reste anisotrope par rapport au gradient vertical, tant aux échelles intermédiaires qu'aux petites échelles.



FIGURE 6.24 – Densités de probabilité des fluctuations de pression p'. Gauche : calcul à l'instant t = 15, sur trois espaces différents,  $0.2 < \overline{c} < 0.5$ ,  $0.5 < \overline{c} < 0.8$  et  $0.2 < \overline{c} < 0.8$ . Droite : calcul pour les deux instants t = 13 et t = 15 sur l'espace  $0.2 < \overline{c} < 0.8$ .

Observons maintenant les densités de probabilité des fluctuations de pression, figure 6.24. Comme déjà évoqué, la turbulence se traduit par une surreprésentation des valeurs négatives, associées aux tourbillons (Lesieur M., 1997, Section 8). On observe que les fortes valeurs négatives de p' sont davantage présentes du côté inférieur de la couche de mélange que du côté supérieur. Ceci est un effet de l'asymétrie de la couche de mélange, prise en compte par le modèle anélastique. L'examen des densités de probabilité à t = 13 et t = 15 montre que l'écoulement semble peu turbulent à l'instant t = 13. À l'instant final de la simulation A01-Sr04, les valeurs négatives de p' descendent jusque  $8 \times 10^{-3}$  environ. La couche de mélange en approximation de Boussinesq montre des valeurs de p' qui descendent jusque -0.03 environ, les fluctuations de pression y sont donc plus intenses en raison d'un état d'avancement supérieur de la simulation.

### 6.2.2.1 Dissipation

La dissipation  $\varepsilon$  d'énergie cinétique turbulente k a été calculée en approximation anélastique à la section 2.8.2. On l'écrit  $\overline{\varepsilon}(z,t) = \frac{1}{Re} \overline{\sigma_{ij} D'_{ij}}$ . Il a été vérifié qu'utiliser l'expression  $\overline{\varepsilon}_{appr} = \frac{1}{Re} \overline{\sigma_{ij} D_{ij}}$  fournit des résultats indiscernables à l'œil nu de l'expression exacte. La figure 6.25 (gauche) présente des profils z de dissipation à différents instants pour la simulation A01-Sr04. La dissipation augmente en intensité avec le temps, en parallèle de l'élargissement de la couche de mélange. On observe une légère asymétrie. Proche du plan z = 0, la dissipation est un peu plus élevée du côté inférieur des aiguilles que du côté supérieur des bulles. À la frontière de la couche de mélange, c'est l'inverse : la dissipation est plus élevée du côté des bulles. Elle reste cependant très faible aux frontières. Le graphe de droite montre l'évolution de la moyenne de la dissipation au cœur de la couche de mélange ( $\beta = 0.2$ ), ainsi que la loi d'échelle de la couche de mélange en approximation de Boussinesq. Comme d'autres grandeurs, la dissipation augmente plus vite dans ce régime précoce de couche de mélange



FIGURE 6.25 – Gauche : profils approchés de la dissipation de l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente (2.143),  $\overline{\varepsilon}_{appr} = \frac{1}{Re} \overline{\sigma_{ij} D_{ij}} \approx \overline{\varepsilon} = \frac{1}{Re} \overline{\sigma_{ij} D'_{ij}}$ . (il a été vérifié que l'écart entre ces deux expressions n'est pas discernable à l'œil). Droite : évolution temporelle de  $\langle \overline{\varepsilon}_{appr} \rangle_{\beta=0.2}$ . La loi d'échelle en t, valide pour les couches de mélange en approximation de Boussinesq, est représentée.

anélastique que la loi d'échelle. À l'approche de l'instant final de la simulation A01-Sr04, la croissance freine.



FIGURE 6.26 – Densités de probabilité de la racine carrée de la dissipation  $\varepsilon_{appr}^{1/2}$  pour les deux instants t = 13 et t = 15 sur l'espace  $0.2 < \overline{c} < 0.8$ . La ligne pointillée met en évidence le comportement exponentiel de la densité de probabilité.

Les densités de probabilité de la racine carrée de la dissipation (homogène à un gradient de vitesse) sont tracées sur le graphe de droite de la figure 6.26. L'allure est exponentielle, la pente augmentant avec le temps et l'intensification de la turbulence. Les valeurs extrêmes sont ainsi de plus en plus probables. Comparée à la figure équivalente pour la couche de mélange en approximation de Boussinesq (figure 5.16, droite), l'allure de la densité de probabilité anélastique à t = 15 correspond à l'instant t = 12.4 en Boussinesq. Les chronométries des simulations A01-Sr0 et A01-Sr04 sont donc bel est bien différentes : la simulation anélastique est moins avancée.

### 6.2.2.2 Vorticité

L'étude de la vorticité est effectuée au moyen de l'étude de ses composantes, par des tracés spatiotemporels et par le calcul de densités de probabilité. L'équation de transport de l'enstrophie, soit l'intégrale spatiale du carré de la vorticité, est ensuite établie et utilisée pour discuter l'importance relative des termes sources. La figure 6.27 (gauche) présente la nappe



FIGURE 6.27 – Gauche : nappe (t, z) de la norme de la vorticité  $\overline{\omega_i \omega_i}^{1/2}$ . Droite : norme de la vorticité normalisée par le taux de croissance auto-semblable en configuration non-stratifiée,  $\overline{\omega_i \omega_i}^{1/2}/h^{1/4}$  à quatre instants t = 12, t = 13, t = 14 et t = 15 et en fonction de z/h. Unique courbe de cette section à être tracée en fonction de z/h, les autres étant tracées en fonction de z.

(t, z) de la norme de la vorticité  $\overline{\omega_i \omega_i}^{1/2}$ . Afin de quantifier la croissance de celle-ci, le graphe de droite contient les profils verticaux de la norme de la vorticité, normalisée par la loi de croissance auto-semblable en configuration de Boussinesq (non stratifiée), et tracés en fonction de la variable auto-semblable z/h. On constate que la croissance de la vorticité est plus rapide que la loi d'échelle. Ce comportement a été observé sur d'autres grandeurs et est relié à la phase de chute libre dans laquelle se trouve la simulation A01-Sr04 à l'instant d'arrêt. Quant à l'abscisse z/h, les courbes ne se superposent pas. Ce tracé permet de constater sans doute possible l'écart à une croissance auto-semblable pour la simulation A01-Sr04.

La croissance comparée du carré de la vorticité et du carré des composantes, moyennées dans le cœur de la couche de mélange, est étudiée sur la figure 6.28. L'écoulement étant majoritairement vertical dans les premières phases de l'instabilité, la composante  $\omega_z \omega_z$  est négligeable jusqu'à la transition à la turbulence. Elle croît ensuite jusqu'à rejoindre les composantes horizontales. Le tracé de l'anisotropie du carré de la vorticité sur le graphe de droite rend bien compte de ce phénomène. Au départ fortement anisotrope, cette quantité l'est de moins en moins et approche l'isotropie à l'instant final de la simulation. Ce comportement est tout à fait similaire à la simulation A01-Sr0 en approximation de Boussinesq.

Les densités de probabilité des composantes horizontale et verticale de vorticité sont tracées sur les figures 6.29 et 6.30. Les ailes sont exponentielles et les pentes augmentent avec le temps. On constate un faible écart pour les valeurs de vorticité les plus élevées entre les deux côtés de la couche de mélange. Le caractère irrégulier des frontières de la couche de mélange et l'inclusion de zones faiblement turbulentes dans le calcul des densités de probabilité explique le caractère pointu des profils obtenus.



FIGURE 6.28 – Gauche : évolution temporelle de l'enstrophie et de ses composantes partielles  $\langle \overline{\omega_i \omega_i} \rangle_{\beta=0.2}$ ,  $\langle \overline{\omega_x \omega_x} \rangle_{\beta=0.2}$  et  $\langle \overline{\omega_z \omega_z} \rangle_{\beta=0.2}$ . Droite : anisotropie de vorticité  $\overline{\omega_z \omega_z}/\overline{\omega_i \omega_i} - 1/3$  à quatre instants t = 12, t = 13, t = 14 et t = 15.



FIGURE 6.29 – Densités de probabilité de la composante horizontale de la vorticité  $\omega_x$ . Gauche : calcul à l'instant t = 15, sur trois espaces différents,  $0.2 < \overline{c} < 0.5$ ,  $0.5 < \overline{c} < 0.8$ et  $0.2 < \overline{c} < 0.8$ . Droite : calcul pour les deux instants t = 13 et t = 15 sur l'espace  $0.2 < \overline{c} < 0.8$ . Les lignes pointillées mettent en évidence le comportement exponentiel de la densité de probabilité.

On définit l'enstrophie par

$$\mathcal{E} = \int_{V} \omega_i \, \omega_i \, dV. \tag{6.7}$$

On souhaite établir l'équation d'évolution de cette quantité, en approximation anélastique. Le point de départ est l'équation de transport de la vorticité (2.94). Après multiplication par



FIGURE 6.30 – Densités de probabilité de la composante verticale de la vorticité  $\omega_z$ . Gauche : calcul à l'instant t = 15, sur trois espaces différents,  $0.2 < \overline{c} < 0.5$ ,  $0.5 < \overline{c} < 0.8$  et  $0.2 < \overline{c} < 0.8$ . Droite : calcul pour les deux instants t = 13 et t = 15 sur l'espace  $0.2 < \overline{c} < 0.8$ . Les lignes pointillées mettent en évidence le comportement exponentiel de la densité de probabilité.

 $\omega_i$ , on obtient

$$\partial_{t}\omega_{i}\omega_{i} + u_{m} \partial_{m}\omega_{i}\omega_{i} = 2 \omega_{i}D_{ij} \omega_{j} - 2 D_{jj} \omega_{i}\omega_{i} + 2 \omega_{i} \frac{\varepsilon_{ijk}}{Re} \partial_{j} \left(\frac{1}{\rho^{(0)}} \partial_{\ell}\sigma_{k\ell}\right) + \frac{2}{S_{r}} \frac{d_{3}\rho^{(0)}}{[\rho^{(0)}]^{2}} \left(\partial_{1}p^{(1)} \omega_{2} - \partial_{2}p^{(1)} \omega_{1}\right) + \frac{2}{\rho^{(0)}} \left(\partial_{1}\rho^{(1)} \omega_{2} - \partial_{2}\rho^{(1)} \omega_{1}\right).$$

$$(6.8)$$

Puis

$$d_{t}\mathcal{E} = \int_{z} 2 \overline{\omega_{i}D_{ij}\omega_{j}}dz - \int_{z} 2 \overline{D_{jj}\omega_{i}\omega_{i}}dz - \int_{z} \overline{u_{m}\partial_{m}\omega_{i}\omega_{i}}dz + \frac{2\varepsilon_{ijk}}{Re} \int_{z} \overline{\omega_{i}\partial_{j}\left(\frac{1}{\rho^{(0)}}\partial_{\ell}\sigma_{k\ell}\right)}dz$$

$$+ \frac{2}{S_{r}} \int_{z} \frac{d_{3}\rho^{(0)}}{[\rho^{(0)}]^{2}} \left(\overline{\partial_{1}p^{(1)}\omega_{2}} - \overline{\partial_{2}p^{(1)}\omega_{1}}\right)dz + \int_{z} \frac{2}{\rho^{(0)}} \left(\overline{\partial_{1}\rho^{(1)}\omega_{2}} - \overline{\partial_{2}\rho^{(1)}\omega_{1}}\right)dz.$$
(6.9)

Or

$$\int_{z} \overline{u_m \,\partial_m \omega_i \omega_i} dz = -\int_{z} \overline{\omega_i \omega_i \,\partial_m u_m} dz = -\int_{z} \overline{\omega_i \omega_i \,D_{mm}} dz \tag{6.10}$$

par intégration par parties. On obtient alors

$$d_{t}\mathcal{E} = \int_{z} 2 \overline{\omega_{i} D_{ij} \omega_{j}} dz - \int_{z} \overline{D_{jj} \omega_{i} \omega_{i}} dz + \frac{2 \varepsilon_{ijk}}{Re} \int_{z} \overline{\omega_{i} \partial_{j} \left(\frac{1}{\rho^{(0)}} \partial_{\ell} \sigma_{k\ell}\right)} dz + \frac{2}{S_{r}} \int_{z} \frac{d_{3} \rho^{(0)}}{[\rho^{(0)}]^{2}} \left(\overline{\partial_{1} \rho^{(1)} \omega_{2}} - \overline{\partial_{2} \rho^{(1)} \omega_{1}}\right) dz + \int_{z} \frac{2}{\rho^{(0)}} \left(\overline{\partial_{1} \rho^{(1)} \omega_{2}} - \overline{\partial_{2} \rho^{(1)} \omega_{1}}\right) dz.$$

$$(6.11)$$

Les termes du membre de droite sont nommés de la façon suivante : étirement, divergence et dissipation pour la première ligne ; production barocline d'enstrophie pour les deux termes de

la deuxième ligne. Le terme de dissipation peut être développé au moyen de l'équation (2.96)

$$\frac{2\varepsilon_{ijk}}{Re}\int_{z}\omega_{i}\partial_{j}\left(\frac{1}{\rho^{(0)}}\partial_{\ell}\sigma_{k\ell}\right)dz = -\frac{2}{Re}\int_{z}\frac{1}{\rho^{(0)}}\overline{\partial_{\ell}\omega_{i}}\partial_{\ell}\omega_{i}\,dz \\
+\frac{2\mathcal{S}}{Re}\int_{z}\frac{1}{\rho^{(0)}}\left(\overline{\omega_{2}\partial_{\ell\ell}^{2}u_{1}-\omega_{1}\partial_{\ell\ell}^{2}u_{2}}\right)dz \qquad (6.12) \\
+\frac{2\mathcal{S}^{2}}{3Re}\int_{z}\frac{1}{[\rho^{(0)}]^{2}}\left(\overline{\omega_{2}\partial_{1}u_{3}-\omega_{1}\partial_{2}u_{3}}\right)dz.$$

où on rappelle que  $S = -d_3 \rho^{(0)} / \rho^{(0)} = Sr (1 + At - 2 At c^{(fin)})^{-1}$  (section 2.1.2.3). La première contribution à la dissipation d'enstrophie anélastique est très proche du terme de dissipation obtenu dans l'équation d'enstrophie en approximation de Boussinesq (5.30). Les deux termes suivants sont des termes issus de la non-nullité de la divergence de vitesse  $\partial_i u_i = Su_3$ .



FIGURE 6.31 – Gauche : évolution temporelle des termes de l'équation d'enstrophie (6.11) pour la simulation A01-Sr04. Droite : rapports des valeurs absolues des contributions à l'équation d'enstrophie : terme d'étirement sur dissipation (bleu), terme d'étirement additionné au terme barocline et au terme de divergence, divisés par la dissipation (vert). L'équilibre (valeur 1) est tracé en pointillés.

L'évolution des différents termes de l'équation (6.11) pour la simulation A01-Sr04 est tracée sur la figure 6.31. Ils sont négligeables pendant la phase de croissance linéaire. Vers t = 10, le terme barocline commence à croître. Sa croissance ralentit à partir de t = 14. Le terme d'étirement des tourbillons devient non-négligeable à partir de t = 11.5 environ. Il dépasse le terme barocline vers t = 13 et devient le principal terme source de l'enstrophie. Le terme basé sur la divergence de la vitesse reste négligeable devant le terme barocline et le terme d'étirement. Bien que les paramètres des simulations Boussinesq A01-Sr0 et anélastique A01-Sr04 sont comparables, les contributions à l'équation d'enstrophie de la simulation anélastique sont sensiblement plus faibles que pour la simulation en approximation de Boussinesq. Cela provient principalement de deux causes. Premièrement, la couche de mélange anélastique est, à l'état final de la simulation, environ deux fois moins épaisse que l'équivalent en approximation de Boussinesq. La simulation A01-Sr04 n'atteint pas un état aussi avancé que la simulation A01-Sr0. La deuxième raison vient de la stratification, qui ralentit la croissance de l'instabilité.

La contribution totale atteint un maximum à  $t \approx 14.5$  puis commence à décroître, phénomène qu'on n'observe pas dans le cas non-stratifié. Les rapports des termes source positifs sur la dissipation (figure 6.31, droite) montrent que la contribution du terme d'étirement se maintient à un bon niveau, alors que le terme barocline devient de plus en plus négligeable. Cela est la conséquence du lissage du gradient de masse volumique en présence de stratification, observé précédemment sur la figure 6.13.



FIGURE 6.32 – Contributions au terme de dissipation de l'équation d'enstrophie, explicités dans l'équation (6.12), en fonction du temps. Le premier terme, proche du terme en approximation de Boussinesq, est tracé en bleu. Les termes suivants, qui font intervenir S et  $S^2$ , sont respectivement tracés en rouge et magenta.

La figure 6.32 représente les trois contributions au terme de dissipation de l'équation d'enstrophie anélastique, décrits par l'équation (6.12). Les termes liés à la divergence nonnulle du champ de vitesse sont cinq et six ordres de grandeurs plus faibles que le terme principal, dont l'expression est proche de la dissipation en approximation de Boussinesq.

### 6.2.3 Mélange

Le mélange de la couche de mélange obtenue dans la simulation anélastique est analysé par des tracés de moyennes, de coefficients de dissymétrie de d'aplatissement, de calculs d'anisotropies, de spectres et de densités de probabilité.

La fraction de mélange moléculaire  $\theta = \overline{c(1-c)}/\overline{c}(1-\overline{c})$  est tracée sur la figure 6.33. La nappe fait apparaître une certaine hétérogénéité dans la direction verticale. La fraction de mélange moléculaire diminue brutalement après la transition à la turbulence et augmente ensuite lentement. L'évolution des moyennes  $\beta = 0.2$  (centre de la couche de mélange) et  $\beta = 0.8$  (majorité de la couche de mélange) est tracée sur la figure 6.34, droite. Le minimum est atteint pour  $t \approx 14$  et vaut 0.65. Dans la simulation proche A01-Sr0 qui fait appel à l'approximation de Boussinesq, le minimum de la fraction de mélange moléculaire est atteint plus tard, en  $t \approx 11$  et vaut 0.76 environ (voir figure 5.24, droite). La différence de chronométrie a déjà été remarquée dans les sections précédentes. On note que l'état atteint en fin de phase de chute libre est davantage mélangé dans la simulation anélastique que dans la simulation en approximation de Boussinesq. Les fluctuations de concentration  $\overline{c'^{2}}^{1/2}$  sont présentées sur la figure 6.34, gauche. Le maximum est atteint autour du plan central z = 0 et est de 0.295 contre 0.25 pour la simulation A01-Sr0. Cela renvoie à une plus forte hétérogénéité dans la couche de mélange anélastique que dans la couche de mélange en approximation de Boussinesq.



FIGURE 6.33 – Gauche : nappe (t, z) de la fraction de mélange moléculaire  $\theta = \overline{c(1-c)}/\overline{c}(1-\overline{c})$ . Droite :  $\theta$  en fonction de z à quatre instants t = 12, t = 13, t = 14 et t = 15.



FIGURE 6.34 – Gauche : fluctuations de concentration  $\overline{c'^2}^{1/2}$  à quatre instants t = 12, t = 13, t = 14 et t = 15. Droite : évolution temporelle de la fraction de mélange moléculaire  $\langle \theta \rangle_{\beta}$ .

Les coefficients de dissymétrie et d'aplatissement des fluctuations de concentration sont représentés sur la figure 6.35. Ces coefficients qualifient la densité de probabilité des fluctuations de concentration (non montrée), qui est symétrique et légèrement écartée d'une gaussienne lorsque calculée dans la couche de mélange. Aux frontières, l'écoulement n'est pas turbulent et les coefficients de dissymétrie et d'aplatissement prennent des valeurs élevées. Le cas est identique à la simulation en approximation de Boussinesq (voir coefficients de dissymétrie et d'aplatissement sur la figure 5.25). L'écart à la gaussienne provient du caractère borné de la grandeur concentration.

Les mêmes grandeurs statistiques sont tracées pour le gradient horizontal des fluctuations de concentration,  $\partial_x c'$ , sur la figure 6.36. Le coefficient de dissymétrie reste presque nul dans la couche de mélange, et modéré aux frontières. Le coefficient d'aplatissement est élevé aux frontières et faible au centre de la couche de mélange (toutefois supérieur à la valeur d'une gaussienne). On peut pronostiquer un comportement symétrique non-gaussien pour les densités de probabilité du gradient horizontal des fluctuations de concentration. Cela est vérifié sur



FIGURE 6.35 – Fluctuations de concentration c'. Gauche : coefficient de dissymétrie des fluctuations de concentration,  $\overline{c'^3}/\overline{c'^2}^{3/2}$ . Droite : coefficient d'aplatissement des fluctuations de concentration,  $\overline{c'^4}/\overline{c'^2}^2$ . Le coefficient d'aplatissement d'un processus gaussien est représenté par la ligne pointillée noire.



FIGURE 6.36 – Gradient horizontal des fluctuations de concentration  $\partial_x c'$ . Gauche : coefficient de dissymétrie  $\overline{(\partial_x c')^3}/\overline{(\partial_x c')^2}^{3/2}$ . Droite : coefficient d'aplatissement  $\overline{(\partial_x c')^4}/\overline{(\partial_x c')^2}^2$ . Le coefficient d'aplatissement d'un processus gaussien est représenté par la ligne pointillée noire.

la figure 6.38. Les densités de probabilité du gradient  $\partial_x c'$  ont des ailes quasi-exponentielles. Cela traduit une surreprésentation des valeurs élevées (en valeur absolue) du gradient  $\partial_x c'$ , ce qui est relié à une organisation des fluctuations de concentration aux échelles intermédiaires. Plus le temps avance, plus les valeurs extrêmes sont représentées, ce qui est cohérent avec l'intensification de la turbulence dans la couche de mélange. L'instant final de la simulation A01-Sr04 n'est pas assez avancé pour que le ralentissement lié à la stratification fasse décliner la turbulence.

Les coefficients de dissymétrie et d'aplatissement du gradient vertical des fluctuations de concentration,  $\partial_z c'$ , sont présentés sur la figure 6.37. Dans les deux cas, les frontières se manifestent par des valeurs élevées des coefficients. Dans la couche de mélange, le coefficient de dissymétrie est presque constant à une valeur positive et modérée. Quant au coefficient



FIGURE 6.37 – Gradient vertical des fluctuations de concentration  $\partial_x c'$ . Gauche : coefficient de dissymétrie  $\overline{(\partial_z c')^3}/\overline{(\partial_z c')^2}^{3/2}$ . Droite : coefficient d'aplatissement  $\overline{(\partial_z c')^4}/\overline{(\partial_z c')^2}^2$ . Le coefficient d'aplatissement d'un processus gaussien est représenté par la ligne pointillée noire.

d'aplatissement, il prend des valeurs élevées. On s'attend donc à ce que les densités de probabilité de  $\partial_z c'$  présentent un profil dissymétrique et un comportement fortement non-gaussien. Cela est vérifié sur la figure 6.39. De manière analogue à la couche de mélange en approximation de Boussinesq (voir figure 5.29), les ailes sont exponentielles avec des pentes différentes (Pumir, 1994b). Il est bien plus probable d'observer des valeurs positives du gradient des fluctuations de concentration que des valeurs négatives. Les fortes valeurs du gradient, positives et négatives, sont de plus en plus probables à mesure que le temps augmente.



FIGURE 6.38 – Densités de probabilité du gradient horizontal des fluctuations de concentration  $\partial_x c'$ . Gauche : calcul à l'instant t = 15, sur trois espaces différents,  $0.2 < \overline{c} < 0.5$ ,  $0.5 < \overline{c} < 0.8$  et  $0.2 < \overline{c} < 0.8$ . Droite : calcul pour les deux instants t = 13 et t = 15 sur l'espace  $0.2 < \overline{c} < 0.8$ .

L'anisotropie du mélange est étudiée au moyen de la quantité  $C_{\partial_z^{(d)}c'}$ , définie au moyen de l'équation (6.6) en remplaçant la composante du champ de vitesse par la concentration. Pour d = 1, on obtient l'anisotropie aux échelles intermédiaires et pour d = 2, l'anisotropie aux petites échelles. Ces deux quantités sont moyennées dans le cœur de la couche de mélange



FIGURE 6.39 – Densités de probabilité du gradient vertical des fluctuations de concentration  $\partial_z c'$ . Gauche : calcul à l'instant t = 15, sur trois espaces différents,  $0.2 < \overline{c} < 0.5$ ,  $0.5 < \overline{c} < 0.8$  et  $0.2 < \overline{c} < 0.8$ . Droite : calcul pour les deux instants t = 13 et t = 15 sur l'espace  $0.2 < \overline{c} < 0.8$ .



FIGURE 6.40 – Gauche : anisotropie de concentration aux échelles intermédiaire  $C_{\partial_z^{(1)}c'}$  (bleu) et aux petites échelles  $C_{\partial_z^{(2)}c'}$  (rouge). Ces deux quantités sont moyennées dans la couche de mélange,  $\beta = z/h < 0.2$ . Droite : Anisotropie aux échelles intermédiaires  $C_{\partial_z^{(1)}c'}$  en fonction de z à quatre instants.

où la turbulence est la plus intense, et tracées sur figure 6.40. Ces quantités augmentent continuellement à partir de la transition à la turbulence et prennent des valeurs proches de zéro à l'instant final de la simulation. Les échelles intermédiaires et petites échelles du mélange sont donc presque isotropes. Tracées en fonction de z à différents instants, l'anisotropie  $C_{\partial_z^{(1)}c'}$  est assez oscillante spatialement, la quantité pour d = 2 l'est aussi (non montré). La structure du mélange est assez hétérogène.

L'efficacité de mélange aux différentes échelles est qualifiée par les multivariances de concentration  $\langle |\nabla^{(d)}c'|^2 \rangle_{\beta}$  (Lin *et al.*, 2011). Le coefficient d = 0 correspond aux grandes échelles, d = 1 correspond aux échelles intermédiaires et d = 2 aux petites échelles. Ces grandeurs calculées dans la couche de mélange sont tracées en fonction du temps sur la figure 6.41



FIGURE 6.41 – Gauche : moyenne spatiale  $\beta = 0.2$  des multivariances de concentration pour les grandes échelles  $\langle \overline{c'^2} \rangle_{\beta}$  (bleu), les échelles intermédiaires  $\langle |\nabla c'|^2 \rangle_{\beta}$  (rouge) et les petites échelles  $\langle |\nabla^2 c'|^2 \rangle_{\beta}$  (noir). Chaque grandeur a été normalisée par son maximum temporel. Droite : spectre des fluctuations de concentration c' compensé par  $k^{-5/3}$  à quatre instants différents. La ligne pointillée met en évidence la zone inertielle.

(gauche), normalisées par leur maximum temporel. Ces grandeurs sont nulles dans un fluide pur ou mélange parfait. Comme dans le cas Boussinesq, la croissance des champignons dans la phase de chute libre s'accompagne d'une augmentation de la valeur des multivariances. À la fin de cette phase, le mélange commence et les quantités diminuent. Cela se manifeste aux grandes échelles en premier, puis aux échelles intermédiaires. La simulation n'est pas assez avancée pour observer une diminution de la multivariance d'ordre 2. Le spectre des fluctuations de concentration, compensé par  $k^{5/3}$ , est présenté sur la figure 6.41. La zone inertielle apparaît et s'élargit avec le temps.

### 6.2.4 Compressibilité et effets thermiques

Cette section s'intéresse aux effets de compressibilité et aux effets thermiques capturés par le modèle anélastique et absents de l'approximation de Boussinesq. Rappelons que le modèle anélastique comprend le mode entropique de Kovásnay mais pas le mode acoustique. En plus du champ de concentration, les champs de masse volumique, de température et le nombre de Mach peuvent être étudiés.

Sur la gauche de la figure 6.42, les maximums spatiaux du nombre de Mach et du paramètre de compressibilité  $\gamma Ma^2$  sont tracés en fonction du temps. Rappelons qu'une des hypothèses de base de l'établissement du modèle anélastique est  $\gamma Ma^2 \ll 1$ . Le nombre de Mach anélastique est calculé suivant l'équation (6.1). La formation des champignons et la transition à la turbulence s'accompagnent d'une augmentation des valeurs du nombre de Mach. À l'instant t = 15, on a Ma  $\approx 0.2$  et  $\gamma Ma^2 \approx 0.065$ . La limite de validité du modèle anélastique est estimée à Ma = 0.3, équivalent à  $\gamma Ma^2 = 0.15$  lorsque les coefficients adiabatiques valent  $\gamma = 5/3$ . La simulation A01-Sr04 respecte ces critères. Le nombre de Mach turbulent est défini par

$$Ma_t = \frac{(u'_i u'_i)^{1/2}}{c_s^{(0)}} \qquad \text{avec} \qquad c_s^{(0)} = \left(\gamma \frac{p^{(0)}}{\rho^{(0)}}\right)^{1/2}.$$
 (6.13)



FIGURE 6.42 – Gauche : évolution des maximums spatiaux du nombre de Mach et du coefficient de compressibilité  $\gamma Ma^2$ . Les limites de validité du modèle sont tracées en noir. Droite : nappe (t, z) des fluctuations de masse volumique  $\overline{\rho'^2}^{1/2}$ .

Le maximum spatial du nombre de Mach turbulent à l'instant d'arrêt de la simulation est  $Ma_t \approx 0.16$ . Il est légèrement plus faible que le nombre de Mach basé sur la vitesse totale. La turbulence présente donc des effets de compressibilité comparables à ceux de l'écoulement dans son ensemble.

Les fluctuations de masse volumique  $\overline{\rho'^2}^{1/2}$  sont tracées sous forme de nappe (t, z) sur la figure 6.42, droite. Elles sont les plus fortes près du plan médian z = 0 et s'intensifient avec le temps. Le début d'un mélange efficace n'a pas provoqué de diminution des fluctuations de masse volumique à l'instant d'arrêt de la simulation.



FIGURE 6.43 – Densités de probabilité des fluctuations de masse volumique  $\rho'$ . Gauche : calcul à l'instant t = 15, sur trois espaces différents,  $0.2 < \overline{c} < 0.5$ ,  $0.5 < \overline{c} < 0.8$  et  $0.2 < \overline{c} < 0.8$ . Droite : calcul pour les deux instants t = 13 et t = 15 sur l'espace  $0.2 < \overline{c} < 0.8$ .

La figure 6.43 montre les densités de probabilité des fluctuations de masse volumique. Une asymétrie apparaît entre valeurs négatives et valeurs positives de  $\rho'$ . Ces dernières sont davantage probables. Les maximums de présence sont atteints pour une valeur faiblement positive de  $\rho'$  (côté supérieur de la couche de mélange) et pour une valeur faiblement négative de  $\rho'$  (côté négatif de la couche de mélange). La présence de ces maximums est probablement reliée aux frontières de la couche de mélange. La représentation des densités de probabilité aux deux instants t = 13 et t = 15 suggère que les ailes de ces densités de probabilité sont proches d'un comportement gaussien. La partie centrale est en revanche éloignée du comportement gaussien, ce qui se traduit par la présence des maximums évoqués. L'amplitude de ceux-ci diminuant avec le temps, on peut faire l'hypothèse que la densité de probabilité de  $\rho'$  dans une couche de mélange anélastique davantage développée a un comportement quasi-gaussien.



FIGURE 6.44 – Gauche : nappe (t, z) de la température  $\overline{T}$ . Droite : profils de moyenne horizontale de température  $\overline{T}(z)$  à 5 instants différents.

L'étude de la température commence par l'observation de la moyenne horizontale de la température notée  $\overline{T}(z,t)$ . La figure 6.44 présente une nappe (t,z) et des profils z de la température moyenne. Pendant la première phase de croissance de l'instabilité, le fluide situé au dessus du plan z = 0 (donc le fluide lourd) s'échauffe et le fluide situé sous le plan z = 0 (donc le fluide léger) se refroidit. Lors de la transition à la turbulence, le profil moyen de température s'inverse. La moitié supérieure de la couche de mélange est refroidie et la moitié inférieure se réchauffe. Cela correspond aux observations faites pour les simulations anélastiques précédentes sur la figure 6.8 : les aiguilles se réchauffent en plongeant et les bulles se refroidissent. Des coupes du champ de température sont tracées sur la figure 6.45. À l'instant précoce t = 7, le fluide lourd, réchauffé, est situé majoritairement dans la partie supérieure du domaine de calcul (z > 0). A l'instant final t = 15, le fluide réchauffé a migré et plongé dans la moitié inférieure du domaine. En se mélangeant partiellement, il s'est légèrement refroidi. La situation est symétrique de l'autre côté du domaine. Ces mouvements expliquent l'allure du champ de température moyenne présenté sur la figure 6.44. Une simulation effectuée avec les équations compressibles complètes du code Aménophis fournit des résultats légèrement différents. Les variations de température constatées au-dessus et en-dessous de l'interface entre les fluides aux instants précoces ne sont pas aussi importantes. Notons que les paramètres physiques At = 0.25 et Sr = 6 de cette simulation compressible sont bien différents de ceux de la simulation anélastique A01-Sr04. Cependant, ce constat pose question sur le champ de température du modèle anélastique. Il faudra y répondre en effectuant une simulation anélastique et une simulation compressible avec les mêmes paramètres physiques.

L'évolution des fluctuations de température  $\overline{T'^2}^{1/2}$  est présentée sur la figure 6.46, gauche. Elles sont maximales autour du plan z = 0, entre t = 12 et t = 13. Lorsque la couche de mé-



FIGURE 6.45 – Coupe de température T sur un plan vertical (y, z). Gauche : t = 7. Droite : t = 15.



FIGURE 6.46 – Nappes (t, z). Gauche : fluctuations de température  $\overline{T'^2}^{1/2}$ . Droite : divergence de vitesse  $\overline{(\partial_i u_i)^2}^{1/2} = |\mathcal{S}| \overline{u_3^2}^{1/2}$ .

lange se développe, les fluctuations de température diminuent. Les densités de probabilité des fluctuations de température T' sont tracées sur la figure 6.47. Contrairement aux fluctuations de masse volumique, elles ne présentent pas d'asymétrie. La frontière supérieure de la couche de mélange se traduit par une forte probabilité d'une valeur légèrement positive de T' et la frontière inférieure par une forte probabilité d'une valeur légèrement négative de T'. Excepté ces deux structures, ces densités de probabilité sont très proches de gaussiennes. La divergence de la vitesse  $\overline{(\partial_i u_i)^2}^{1/2} = |\mathcal{S}| \overline{u_3^2}^{1/2}$  est tracée sur la figure 6.46, droite. Elle s'intensifie avec le temps et atteint son maximum près du plan médian z = 0. L'inverse de la divergence du champ de vitesse, qu'on peut interpréter comme un temps caractéristique des effets de compressibilité, atteint des valeurs de 40 environ, au centre de la couche de mélange. C'est le triple du temps de simulation, ce qui signifie que la compressibilité reste faible, comme prédit par le maximum spatial mesuré  $max(\gamma Ma^2) \approx 0.065$ .

Les densités de probabilité du nombre de Mach sont tracées sur la figure 6.48. On observe



FIGURE 6.47 – Densités de probabilité des fluctuations de température T'. Gauche : calcul à l'instant t = 15, sur trois espaces différents,  $0.2 < \overline{c} < 0.5$ ,  $0.5 < \overline{c} < 0.8$  et  $0.2 < \overline{c} < 0.8$ . Droite : calcul pour les deux instants t = 13 et t = 15 sur l'espace  $0.2 < \overline{c} < 0.8$ .



FIGURE 6.48 – Densités de probabilité de nombre de Mach. Gauche : calcul à l'instant t = 15, sur trois espaces différents,  $0.2 < \overline{c} < 0.5$ ,  $0.5 < \overline{c} < 0.8$  et  $0.2 < \overline{c} < 0.8$ . Droite : calcul pour les deux instants t = 13 et t = 15 sur l'espace  $0.2 < \overline{c} < 0.8$ .

peu de différence entre les deux moitiés de la couche de mélange, excepté une légère surreprésentation de la valeur Ma  $\approx 0.16$  dans la moitié inférieure. Comme constaté pour la première phase de croissance de l'instabilité sur la figure 6.12, plus le temps passe et plus le support de la densité de probabilité s'élargit vers les grandes valeurs. Ce constat tient donc également pour la phase de couche de mélange.

## 6.3 Bilan

On a présenté dans ce chapitre les résultats de quatre simulations numériques effectuées avec le modèle anélastique implanté dans le code pseudo-spectral Aménophis (voir chapitre 3). Chaque simulation a été arrêtée avant que le maximum spatial du paramètre de compressibilité  $\gamma Ma^2$  ne devienne non négligeable devant 1.

Les trois premières simulations ont concerné l'étude des premières phases de croissance de l'instabilité de Rayleigh-Taylor. L'observation de l'influence des paramètres de compressibilité, le nombre d'Atwood et le paramètre de stratification, est un des buts de l'étude. Les observations suivantes ont été faites :

(i) La croissance linéaire d'un état initial piloté par le système d'équations anélastiques présente des différences macroscopiques avec la croissance du même état initial piloté par le système d'équations compressibles. Ces différences ne sont pas explicables par l'influence seule de l'acoustique. En particulier, la sensibilité des modes les plus instables au paramètre de stratification semble bien plus forte en approximation anélastique. Résoudre le problème linéaire anélastique permettrait d'obtenir des courbes de dispersion et d'évaluer précisément le niveau de la surestimation de la stabilité des petites échelles induite par le modèle anélastique.

(*ii*) Pour les trois premières simulations analysées, les structures de fluide lourd plongeant dans le fluide léger se réchauffent et les structures ascendantes de fluide léger se refroidissent. La dissymétrie des structures supérieures et inférieures, en particulier leur largeur, est capturée par le modèle anélastique.

*(iii)* Les densités de probabilité du nombre de Mach tracées à différentes dates présentent un comportement particulier. La probabilité de présence de la valeur la plus probable du nombre de Mach évolue comme l'inverse du cette valeur. La gamme de nombres de Mach présents s'élargit du côté des grandes valeurs.

(iv) Simuler une couche de mélange au moyen du modèle anélastique demande un nombre d'Atwood et un paramètre de stratification faibles. Dans le cas contraire, l'intensité des phénomènes de compressibilité qui se développent est incompatible avec le domaine de validité du modèle. Ces situations requièrent les équations compressibles.

L'étude a ensuite concerné une couche de mélange turbulente en approximation anélastique. Celle-ci n'est pas poussée jusqu'à la saturation de la couche de mélange, car si le modèle anélastique capture convenablement la croissance ralentie de la couche de mélange en raison de la stratification, il ne capture pas l'arrêt total de la croissance lorsque la couche de mélange atteint la saturation (voir section 1.1.1). Le nombre d'Atwood At = 0.1 et la stratification Sr = 0.4 de la simulation anélastique sont faibles de façon à envisager des comparaisons avec la simulation en approximation de Boussinesq analysée au chapitre 5. Les résultats sont les suivants :

(I) La couche de mélange n'a pas atteint le régime de saturation caractérisé par l'arrêt de la croissance en raison de la stratification. Le saut de masse volumique est fortement atténué et la croissance de la couche de mélange est en cours de ralentissement à l'instant d'arrêt de la simulation. Le terme de production barocline de l'équation d'enstrophie a atteint un palier. La contribution totale des termes source de cette équation a atteint un maximum et est en diminution. La couche de mélange est parvenue à une épaisseur suffisante pour les analyses statistiques. Les frontières de la couche présentent une forte hétérogénéité spatiale, qui se caractérise par la présence de quelques structures (bulles et aiguilles) en avance sur les autres.

(II) Le nombre de Reynolds basé sur la micro-échelle verticale de Taylor atteint la valeur de 117. Les spectres présentent une zone inertielle mieux visible que pour la simulation en approximation de Boussinesq, qui possède pourtant des nombres de Reynolds plus élevés. On peut faire l'hypothèse que la quantité de fluides purs au repos injectés dans la couche de mélange à la fin de la simulation anélastique est faible, en raison du ralentissement de la croissance lié à la stratification. La zone turbulente serait moins perturbée que dans le cas de Boussinesq et la turbulence davantage établie et homogène.

(III) En raison de la stratification, des écarts aux lois d'échelles établies dans le cas non

stratifié de Boussinesq sont observables. Cela est davantage visible pour les grandeurs liées aux mouvements verticaux des fluides qu'aux mouvements horizontaux.

(IV) Les densités de probabilité des fluctuations de pression, de vorticité et de la racine carrée de la dissipation présentent des ailes exponentielles caractéristiques de l'intermittence des écoulements turbulents. Les densités de probabilité des fluctuations de masse volumique et de température sont proches de gaussiennes, excepté aux frontières de la couche de mélange.

(V) L'état maximal de mélange en fin de phase de chute libre est mieux mélangé que dans le cas non-stratifié.

(VI) Le nombre de Mach est maximal au cœur de la couche de mélange. Il prend une valeur modérée en fin de simulation malgré les faibles valeurs du nombre d'Atwood et du paramètre de stratification.

(VII) L'évolution temporelle du champ de température est séparable en deux phases. Avant la formation des champignons, le fluide lourd situé dans la moitié supérieure du domaine se réchauffe et le fluide léger se refroidit. À la formation des champignons, le fluide lourd réchauffé plonge et le fluide léger refroidi s'élève dans le domaine, ce qui occasionne un renversement du champ de température moyen.

# Conclusion

On montre dans ce manuscrit que l'instabilité de Rayleigh-Taylor pour des fluides miscibles peut être étudiée avec cinq familles de modèles physiques. Les équations compressibles sont le point de départ des calculs d'établissement des modèles, les deux premiers étant obtenus par un développement asymptotique sur le petit paramètre  $\gamma Ma^2$ . Le modèle anélastique est valide en présence d'une stratification modérée des fluides lourd et léger sous l'effet de la gravité et capture les effets de compressibilité dynamique. Un degré de liberté existe dans le modèle, sous la forme de la définition de l'état de base. Le modèle quasi-isobare est valide pour une configuration initiale non stratifiée. Tout comme le modèle anélastique, il comprend le mode entropique et donc des effets thermiques et de compressibilité. Ce modèle peut être réduit au modèle de Sandoval, dont on propose un établissement rigoureux et relié aux autres modèles. La thermodynamique est éliminée des équations, l'écoulement est isotherme et la masse volumique ne dépend pas de la pression. La compressibilité dynamique est absente et les fluides se comportent comme des liquides incompressibles. Enfin, on peut obtenir le modèle de Boussinesq qui n'est valide que pour des fluides incompressibles de masses volumiques très proches. Excepté le modèle compressible, aucun de ces modèles ne contient le mode acoustique de Kovásnay. L'absence d'ondes acoustiques autorise un pas de temps plus élevé et donc un coût inférieur pour les simulations. À ce jour, le modèle quasi-isobare n'a pas été utilisé dans le cadre de l'étude d'une couche de mélange de Rayleigh-Taylor. Ce manuscrit présente, notamment, les premières simulations anélastiques en trois dimensions.

Le code de simulation Aménophis s'appuie sur une méthode pseudo-spectrale Chebyshev-Fourier-Fourier avec décomposition en sous-domaines dans la direction verticale. La résolution des équations anélastiques est améliorée, notamment par l'implantation d'un schéma itératif pour toutes les grandeurs physiques et la définition d'une fonctionnelle efficace pour la répartition dynamique des sous-domaines. En outre, le modèle de Boussinesq est ajouté au code de simulation. Une étude comparative de la précision atteinte pour un jeu de simulations montre l'intérêt de la décomposition en sous-domaines adaptatifs. La convergence exponentielle du schéma d'espace est retrouvée; l'ordre de convergence du schéma temporel est mesuré et est satisfaisant. Un troisième niveau de parallélisation faisant appel au protocole OpenMP est ajouté aux deux niveaux MPI, ce qui assure une utilisation optimale des ressources du supercalculateur.

Des éléments de validation du code de simulation sont décrits. Le taux de croissance linéaire monomode anélastique est comparée à la théorie linéaire et montre un bon accord. De plus, une simulation en approximation de Boussinesq permet de reproduire l'expérience de croissance de champignons d'un écoulement Rayleigh-Taylor de Waddell *et al.* (2001) avec une très bonne fidélité. Enfin, la couche de mélange turbulente simulée avec le modèle de Boussinesq fournit des résultats tout à fait conformes à la littérature (largeur de mélange, quantités statistiques).

Des visualisations sur diverses simulations avec les modèles anélastique et de Boussinesq ont permis de dégager ou de retrouver des éléments qualitatifs des écoulements Rayleigh-Taylor. Les frontières de la couche de mélange font apparaître des structures caractéristiques en forme de champignons ou de tores suivant la quantité observée. À l'inverse, l'intérieur de la couche de mélange semble être proche d'un écoulement turbulent homogène et isotrope. Le critère Q se manifeste sous la forme d'un grand nombre de vortex orientés dans toutes les directions, tandis que les structures dissipatives apparaissent sous forme de feuillets. L'intérieur de la couche de mélange, et notamment la distribution d'énergie cinétique turbulente, est très hétérogène. Des zones de fluides purs peuvent encore être trouvées dans la couche, même bien après la transition à la turbulence. Les simulations avec le modèle anélastique mettent en évidence l'asymétrie de la couche de mélange, les bulles étant refroidies et les aiguilles échauffées. Les nombres de Mach les plus élevés sont rencontrés dans les zones de mouvement vertical des fluides, dans toute l'épaisseur de la couche.

Une simulation en approximation de Boussinesq a été réalisée jusqu'à un instant où la turbulence est développée, une zone inertielle apparaissant clairement. Durant la phase de couche de mélange, les quantités moyennes ont un comportement auto-semblable. Cependant, pour certaines quantités d'ordre élevé ou dérivées, le régime auto-semblable n'est pas complètement atteint. En particulier, les statistiques liées à la dynamique sont moins bien convergées que les statistiques liées au mélange. Par ailleurs, on peut établir théoriquement que la dissipation et l'enstrophie suivent des lois d'échelles, avec lesquelles les données de la simulation sont en accord. Un déséquilibre permanent est atteint pour l'enstrophie, dans lequel les termes d'étirement et de dissipation dominent largement le terme barocline.

Aux bords de la couche de mélange, les structures gardent la mémoire de l'instabilité qui a généré la turbulence. À l'inverse, dans la couche de mélange, les propriétés de la turbulence et de l'intermittence ont plusieurs points communs avec la turbulence homogène et isotrope, notamment les densités de probabilité de pression et de vorticité. Si l'anisotropie aux échelles intermédiaires est négligeable, ce n'est pas le cas aux petites échelles pour lesquelles une petite anisotropie subsiste. On peut faire l'hypothèse que l'hétérogénéité du champ de masse volumique à ces échelles en raison d'un mélange non abouti permet à la flottabilité de perturber la turbulence aux petites échelles. Dépasser la transition de mélange permettrait de réduire les gradients de masse volumique et de rendre l'écoulement isotrope aux petites échelles.

Deux états de base différents sont testés pour le degré de liberté du modèle anélastique. Le choix de l'état initial entraîne l'apparition de divers phénomènes non physiques sur la divergence du champ de vitesse et sur la température. L'état final est retenu comme état de base et fournit des résultats cohérents. Le modèle anélastique est utilisé pour quatre simulations, trois d'entre elles étant centrées sur l'étude des paramètres de compressibilité dans les premières phases de l'instabilité. On constate que la croissance linéaire d'un état initial stratifié piloté par les équations du modèle anélastique est différente de la croissance du même état initial mais piloté par les équations compressibles. L'effet stabilisant de la stratification sur les petites échelles est surestimé par le modèle anélastique. Ces trois premières simulations permettent d'observer que le modèle anélastique capture bien les effets thermiques de refroidissement des bulles et d'échauffement des aiguilles, ainsi que la différence de largeur entre ces structures. La densité de probabilité des nombres de Mach dans l'écoulement est mesurée, une loi empirique décrit convenablement l'élargissement de la densité de probabilité vers les grandes valeurs quand le temps augmente.

La quatrième simulation anélastique décrite dans ce manuscrit est arrêtée au stade de couche de mélange. Les paramètres de compressibilité sont faibles, ce qui permet d'initier quelques comparaisons avec la simulation en approximation de Boussinesq. Le phénomène de saturation de la couche de mélange n'est pas atteint et n'est pas observable avec le modèle anélastique. En revanche, le ralentissement de la croissance de l'enstrophie est montré, comme conséquence de la stratification et du lissage du saut initial de masse volumique. La zone inertielle observable sur les spectres de vitesse est plus large que la simulation en approximation de Boussinesq malgré des nombres de Reynolds de Taylor plus faibles. On peut faire l'hypothèse que la stratification du champ de masse volumique provoque le ralentissement de l'entraînement de fluide pur dans la couche de mélange, ce qui perturbe moins l'écoulement turbulent dans celle-ci. Les écarts aux lois d'échelle valides dans les situations non-stratifiées sont clairs, et davantage visibles pour les quantités liées à la direction verticale. Quant au nombre de Mach, ses valeurs maximales sont mesurées au centre de la couche de mélange et ne sont pas complètement négligeables à l'instant d'arrêt de la simulation, malgré les faibles valeurs du nombre d'Atwood et du paramètre de stratification. Enfin, le champ de température moyen évolue en deux étapes. Lors des premières phases de croissance à vitesse faible, le fluide léger se refroidit et le fluide lourd se réchauffe. À la formation des structures non-linéaires, les fluides échangent partiellement leurs positions et le champ de température moyen se renverse.

Considéré dans son ensemble, le problème de la simulation des couches de mélange turbulentes de Rayleigh-Taylor peut être séparé en deux problèmes, selon la valeur du paramètre de stratification. S'il est non nul, les fluides sont stratifiés sous l'effet de la gravité et s'il l'est, les fluides ont des masses volumiques initiales uniformes. L'utilisation des équations de Navier-Stokes compressibles pour l'étude de la première situation est extrêmement coûteuse. C'est néanmoins le seul modèle valide en cas de forte stratification. Le développement du modèle anélastique est motivé par l'étude des situations modérément stratifiées. Non exempt de limitations, ce modèle permet de réaliser des simulations de ces configurations avec un coût maîtrisé. Le choix d'un nombre d'Atwood ou d'un paramètre de stratification trop élevé restreint les simulations aux premières phases de croissance de l'instabilité en raison des valeurs atteintes par le nombre de Mach. La résolution du problème linéaire anélastique est un objectif, et permettrait de mieux comprendre ce modèle. L'influence de la stratification et des coefficients adiabatiques pourrait être explorée, comme préambule à une analyse paramétrique au moyen de multiples simulations numériques directes.

La saturation de la couche de mélange comme conséquence de la saturation a été observée expérimentalement par Lawrie & Dalziel (2011). Cependant, la stratification n'a pas la même origine que celle décrite dans cette thèse. Les fluides sont stratifiés non pas comme conséquence de leur compressibilité et de la gravité, mais en raison d'un gradient vertical de concentration d'un soluté. Développer un modèle anélastique dans ce cadre différent, où le champ de concentration définit la concentration en soluté et non la concentration en fluide lourd, pourrait permettre de reproduire cette expérience.

Dans la situation de fluides de masses volumiques initiales constantes, trois modèles sont établis. L'approximation de Boussinesq est le plus simple, et est *a priori* le seul modèle à pouvoir montrer une croissance auto-semblable pour toutes les quantités, la seule longueur que l'on peut construire par analyse dimensionnelle étant  $gt^2$ . Les modèles de Sandoval et quasi-isobare ne possèdent pas la limitation aux petits nombres d'Atwood. En revanche, ces modèles font apparaître des longueurs caractéristiques dans leur équation de divergence de vitesse et il paraît donc peu probable qu'ils puissent rendre compte d'un régime de croissance auto-semblable parfaitement établi pour une couche de mélange. Le modèle quasi-isobare est le modèle adéquat pour des fluides de masses volumiques initiales uniformes et qui capture la thermodynamique de l'écoulement. Le nombre d'Atwood peut prendre toutes les valeurs. Ce modèle mérite une analyse poussée, pour la croissance linéaire et la phase de couche de mélange. Pour les configurations non stratifiées, il rend compte des effets de compressibilité pour les fluides mis en jeu, qui peuvent être considérés comme des gaz. La variation des effets thermiques et de compressibilité dynamique en fonction des paramètres physiques seraient le point d'intérêt des simulations avec ce modèle.

Lorsque le nombre d'Atwood est faible, l'approximation de Boussinesq est utilisable et n'a pas encore livré toutes les réponses, notamment à propos de l'anisotropie aux petites échelles. Dépasser la transition de mélange et tenter d'atteindre un régime complètement établi de croissance auto-semblable sont deux objectifs qui restent à remplir pour les années à venir.

Ces travaux ont bénéficié d'un accès aux moyens de calcul du TGCC au travers de l'allocation de ressources t20142a6133 attribuée par GENCI.

# Publications

Schneider, N., & Gauthier, S. (2015). Asymptotic analysis of Rayleigh-Taylor flow for Newtonian miscible fluids. *Journal of Engineering Mathematics*, 92(1), 55-71.

Schneider, N., Hammouch, Z., Labrosse, G., & Gauthier, S. (2015). A spectral anelastic Navier-Stokes solver for a stratified two-miscible-layer system in infinite horizontal channel. *Journal of Computational Physics*, 299, 374-403.

Schneider, N. & Gauthier, S. (2016). Visualization of Rayleigh-Taylor flows from Boussinesq approximation to fully compressible Navier-Stokes model. *Fluid Dynamic Research*, 48(1)

Schneider, N. & Gauthier, S. (2015). Vorticity and mixing in Rayleigh-Taylor Boussinesq turbulence. *Soumis.* 

# Communication orale

Schneider, N. (2014). Rayleigh-Taylor induced turbulent mixing layers, *Turbulent Mixing and Beyond*. Young scientist award.

# ANNEXE A

# Assemblage de la matrice de primitivation Chebyshev en présence de transformation de coordonnées

Une des méthodes envisagées pour calculer la pression anélastique à k = 0 nécessite d'effectuer des intégrations suivant l'axe Chebyshev (voir section 3.1.1.6).

Soit une fonction u définie sur la grille de points de collocation. La primitive de cette fonction s'écrit par exemple :

$$I_u(z) = \int_{z_{inf}}^{z} u(z') dz'.$$
 (A.1)

Rappelons que la grille de points comprend une transformation de coordonnées, destinée à améliorer la précision de calcul en captant mieux les forts gradients. Le domaine de calcul est ainsi ramené de  $[z_{inf}, z_{sup}]$  à [-1, 1]. On écrit  $z = h(\xi, a)$ , où  $z \in [z_{inf}, z_{sup}]$ ,  $\xi \in [-1, 1]$  et  $a \in \mathbb{R}$  est un paramètre. Par changement de variable, on a alors :

$$I_u(\xi) = \int_{-1=h^{-1}(z_{inf},a)}^{\xi=h^{-1}(z,a)} u(h(\xi',a)) \frac{\partial h}{\partial \xi}(\xi',a) \, d\xi'.$$
(A.2)

Décomposons sur la base des polynômes de Chebyshev  $(T_n)_{n \in [0,N]}$ :

$$u(h(\xi',a)) \frac{\partial h}{\partial \xi}(\xi',a) = \sum_{n=0}^{N} \widehat{U}_n^h T_n(\xi').$$
(A.3)

L'équation (A.2) se réécrit alors :

$$I_u(\xi) = \sum_{n=0}^N \widehat{U}_n^h \int_{-1}^{\xi} T_n(\xi') d\xi'.$$
 (A.4)

Pour la suite, on utilise l'égalité suivante valable pour  $\ n\geq 2$  :

$$2T_n(\xi) = \frac{1}{n+1} \frac{\mathrm{d}T_{n+1}}{\mathrm{d}x}(\xi) - \frac{1}{n-1} \frac{\mathrm{d}T_{n-1}}{\mathrm{d}x}(\xi), \ \xi \in [-1,1].$$
(A.5)

On sait de plus que  $T_n(-1) = (-1)^n$ , d'où :

$$\int_{-1}^{\xi} T_n(\xi')d\xi' = \frac{1}{2(n+1)}T_{n+1}(\xi) - \frac{1}{2(n-1)}T_{n-1}(\xi) + \frac{(-1)^{n+1}}{(n+1)(n-1)}, \ n \ge 2.$$
(A.6)

Pour n = 0:

$$\int_{-1}^{\xi} T_0(\xi') d\xi' = \int_{-1}^{\xi} 1 d\xi' = \xi + 1 = T_0(\xi) + T_1(\xi).$$
(A.7)

Pour n = 1:

$$\int_{-1}^{\xi} T_1(\xi')d\xi' = \int_{-1}^{\xi} \xi'd\xi' = \frac{1}{2}(\xi^2 - 1) = \frac{1}{4}(T_2(\xi) - T_0(\xi)).$$
(A.8)

Et finalement :

$$I_{u}(\xi) = \widehat{U}_{0}^{h} \left[ T_{0}(\xi) + T_{1}(\xi) \right] + \frac{\widehat{U}_{1}^{h}}{4} \left[ T_{2}(\xi) - T_{0}(\xi) \right] + \sum_{n=2}^{N} \widehat{U}_{n}^{h} \left[ \frac{1}{2(n+1)} T_{n+1}(\xi) - \frac{1}{2(n-1)} T_{n-1}(\xi) + \frac{(-1)^{n+1}}{(n+1)(n-1)} \right].$$
(A.9)

Posons:

$$I_u(\xi) = \sum_{n=0}^{N} \widehat{U}_n^{h,(-1)} T_n(\xi).$$
(A.10)

Soient  $\widehat{\mathbf{U}}^{\mathbf{h},(-1)}$  et  $\widehat{\mathbf{U}}^{\mathbf{h}}$  les vecteurs colonnes composés respectivement des  $(\widehat{U}_n^{h,(-1)})_{n\in[0,N]}$  et des  $(\widehat{U}_n^h)_{n\in[0,N]}$ . On note  $\widehat{P}$  la matrice de primitivation dans l'espace spectral telle que :

$$\widehat{\mathbf{U}}^{\mathbf{h},(-1)} = \widehat{P} \ \widehat{\mathbf{U}}^{\mathbf{h}}.\tag{A.11}$$

La matrice  $\widehat{P}$  ainsi définie est presque identique à la matrice de primitive première explicitée dans (Labrosse, 2011), section 5.7.2.1. Seule la première ligne est différente, ceci est lié à un autre choix de la constante d'intégration.

La matrice  $\widehat{P}$  permet d'intégrer dans l'espace spectral; on souhaite intégrer dans l'espace physique. Rappelons l'existence de la matrice  $\mathbb{T}$ , qui permet de passer de l'espace spectral Chebyshev à l'espace physique. Soit  $\mathbf{U}^h$  le vecteur composé des  $(U_n^h)_{n \in [0,N]}$ , définis tels que :

$$U_n^h = u(h(\xi_n, a)) \frac{\partial h}{\partial \xi}(\xi_n, a), \qquad (A.12)$$

où le maillage de l'intervalle [-1, 1] est composé comme suit :  $\xi_0 = -1 < \xi_1 < ... < \xi_{N-1} < \xi_N = 1$ . On a :  $\mathbf{U}^h = \mathbb{T} \widehat{\mathbf{U}}^h$ . Définissons encore  $\mathbf{I}_{\mathbf{u}}$ , comme le vecteur colonne contenant les  $(I_u(\xi_n))_{n \in [0,N]}$ . On a :

$$\mathbf{I}_{\mathbf{u}} = \mathbb{T} \ \widehat{P} \ \mathbb{T}^{-1} \ \mathbf{U}^h. \tag{A.13}$$

Notons que  $U_n^h$  peut s'écrire sous la forme :  $U_n^h = U_n h_n$ , avec  $U_n = u(h(\xi_n, a))$  et  $h_n = \frac{\partial h}{\partial \xi}(\xi_n, a)$ . Dès lors, on définit le vecteur **U** composé des  $(U_n)_{n \in [0,N]}$ . On définit aussi la matrice carrée diagonale **C**, composée des termes diagonaux  $(h_n)_{n \in [0,N]}$ . Il est clair qu'on a  $\mathbf{U}^h = \mathbf{C} \mathbf{U}$ . On aboutit à l'écriture de la matrice de primitivation dans l'espace physique avec transformation de coordonnées :

$$\mathbf{P}_{\mathbf{coord}} = \mathbb{T} \ \widehat{\mathbf{P}} \ \mathbb{T}^{-1} \ \mathbf{C}. \tag{A.14}$$

La primitive  $u^{(-1)}$  de la fonction u définie pour  $z \in [z_{inf}, z_{sup}]$  s'écrit alors vectoriellement de la façon suivante :  $\mathbf{U}^{(-1)} = \mathbf{P_{coord}} \mathbf{U}$ .

# Annexe B Analyse de stabilité linéaire du système anélastique

Le système d'étude est l'état initial de l'instabilité de Rayleigh-Taylor défini en section 2.1.2.2. Le système est gouverné par les équations anélastiques (2.36)-(2.30). Dans le cadre de la méthode des modes normaux, on définit une perturbation irrotationnelle  $\phi$  telle que  $u_i = \partial_i \phi$ . On l'écrit pour chaque fluide, H pour heavy et L pour light

$$\phi_{H,L} = \widehat{\phi}_{H,L}(z) \,\mathrm{e}^{\sigma t} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\,(kx+k_y y)},\tag{B.1}$$

où on a utilisé la périodicité horizontale du problème et supposé une croissance exponentielle de la perturbation. Cette expression est injectée dans l'équation de continuité anélastique et on obtient :

$$d_{zz}\widehat{\phi}_{H,L} - \mathcal{S}d_z\widehat{\phi}_{H,L} - k^2\widehat{\phi}_{H,L} = 0, \qquad (B.2)$$

avec  $S = Sr/(1 + At - 2Atc^{(0)})$  et  $k^2 = k_x^2 + k_y^2$ . Les solutions de ces équations s'écrivent

$$\widehat{\phi}_{H,L} = \lambda_{H,L} \mathrm{e}^{r_1 z} + \mu_{H,L} \mathrm{e}^{r_2 z},\tag{B.3}$$

où  $r_1 = 1/2(\mathcal{S} + \sqrt{\mathcal{S}^2 + 4k^2})$  et  $r_1 = 1/2(\mathcal{S} - \sqrt{\mathcal{S}^2 + 4k^2}).$ 

Les conditions aux limites permettent de déterminer les constantes  $\lambda_{H,L}$  et  $\mu_{H,L}$ . La vitesse verticale  $u_3 = \partial_3 \phi_{H,L}$  est nulle aux parois inférieure et supérieure du domaine, ce qui se traduit par  $u_{3L}(z = -h_L) = 0$  et  $u_{3H}(z = h_H) = 0$ . En outre, la vitesse est continue en z = 0 entre les deux fluides d'où  $u_{3L}(z = 0) = u_{3H}(z = 0)$ . Les deux premières conditions fournissent une relation entre  $\lambda_L$  et  $\mu_L$  d'une part et entre  $\lambda_H$  et  $\mu_H$  d'autre part

$$\lambda_L = -\mu_L \frac{r_2}{r_1} e^{-(r_2 - r_1)h_L} \quad \text{et} \quad \lambda_H = -\mu_H \frac{r_2}{r_1} e^{(r_2 - r_1)h_H}.$$
 (B.4)

Pour un écoulement potentiel, l'équation de Bernoulli peut s'écrire sous la forme

$$\partial_t \phi + \frac{1}{2} \partial_j \phi \ \partial_j \phi + h + U = 0. \tag{B.5}$$

L'enthalpie h s'exprime  $h = \frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{p}{\rho}$  et U est le potentiel des forces extérieures. Il s'agit ici des forces de gravité, U = gz. Travaillant sur une perturbation infinitésimale, le terme quadratique est négligé et il reste

$$\rho(\partial_t \phi + gz) + \frac{\gamma}{\gamma - 1}p = 0.$$
(B.6)

L'hypothèse d'égalité des coefficients adiabatiques des fluides léger et lourd permet d'éliminer le terme d'enthalpie compte tenue de la continuité de la pression en z = 0. Notons que l'équation résultante garde la même forme après adimensionnement et on peut écrire

$$\rho_H(0) \Big( \partial_t \phi_H(0) + \xi(0) \Big) = \rho_L(0) \Big( \partial_t \phi_L(0) + \xi(0) \Big), \tag{B.7}$$
où xi(0) est le déplacement de l'interface entre les deux fluides. La continuité de la vitesse verticale à l'interface s'exprime sous la forme

$$u_{3L}(z=0^{-}) = u_{3H}(z=0^{+}) = \partial_t \xi(0) = \sigma \xi(0).$$
 (B.8)

L'équation (B.7) se réécrit alors

$$\rho_H(0)\Big(\widehat{\phi}_H(0) + \frac{1}{\sigma}d_z\widehat{\phi}_L(0)\Big) = \rho_L(0)\Big(\widehat{\phi}_L(0) + \frac{1}{\sigma}d_z\widehat{\phi}_L(0)\Big),\tag{B.9}$$

ou encore

$$\sigma^2 \Big[ \rho_H(0) \widehat{\phi}_H(0) - \rho_L(0) \widehat{\phi}_L(0) \Big] = d_z \widehat{\phi}_L(0) (\rho_L(0) - \rho_H(0)).$$
(B.10)

Plusieurs étapes calculatoires suivent. Premièrement, la continuité de la vitesse à l'interface fournit une relation entre  $\mu_L$  et  $\mu_H$ . Deuxièmement, remplacer les termes  $\hat{\phi}_{L,H}(0)$  par leur expression conduit à définir les deux constantes suivantes :

$$F_L = \frac{1 - \frac{r_2}{r_1} e^{-(r_2 - r_1)h_L}}{1 - e^{-(r_2 - r_1)h_L}} \quad \text{et} \quad F_H = \frac{1 - \frac{r_2}{r_1} e^{(r_2 - r_1)h_H}}{1 - e^{(r_2 - r_1)h_H}}.$$
 (B.11)

Après quelques manipulations, on obtient l'expression de la relation de dispersion

$$\sigma^2 = \frac{2r_2At}{(1-At)F_L - (1+At)F_H}.$$
(B.12)

### Annexe C

# Calcul de densités de probabilité sur une grille non-uniforme

#### Méthode de calcul par noyau

La méthode d'estimation par noyau est utilisée pour calculer les densités de probabilité présentées dans cette thèse. Elle généralise la méthode des histogrammes. Dans ce dernier cas, on doit déterminer la largeur des intervalles. Si elle est petite, alors la courbe histogramme comprend beaucoup de points; en revanche l'incertitude est grande sur l'ordonnée de chaque point de cette courbe. Si elle est large, alors la courbe histogramme comprend peu de points, mais leur ordonnée est calculée précisément.

La force de la méthode d'estimation par noyaux est de s'affranchir du couplage entre ces deux paramètres. Le nombre de points de discrétisation de la courbe résultat est indépendant de la largeur de la fenêtre. Considérons  $N_e$  valeurs échantillons  $(p_i)$ ,  $i = 1, \ldots, N_e$  dont on souhaite tracer la densité de probabilité qu'on note f. On se donne  $N_d$  points de discrétisation  $(P_k)$ ,  $k = 1, \ldots, N_d$  de la densité de probabilité. On a alors :

$$f(P_k) = \frac{1}{N_e h} \sum_{i=1}^{N_e} K\left(\frac{P_k - p_i}{h}\right),$$
 (C.1)

où h est la largeur de la fenêtre et K est la fonction noyau. Il existe un certain nombre de fonctions noyaux, le plus fréquemment utilisé est le noyau gaussien  $K_q$ , tel que :

$$K_g(u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{u^2}{2}\right),\tag{C.2}$$

pour lequel h admet une expression théorique idéale :

$$h_{id} = \left(\frac{4}{3}\right)^{\frac{1}{5}} \sigma_e \ N_e^{-\frac{1}{5}},\tag{C.3}$$

où  $\sigma_e$  est l'écart-type des échantillons.

À l'extérieur de la couche de mélange, les vitesses sont quasi-nulles et on ne souhaite pas utiliser ces données dans la densité de probabilité : un des objectifs est de qualifier la turbulence Rayleigh-Taylor. On se restreint donc à la couche de mélange de la façon suivante :

- 1. Calcul d'un profil de concentration moyenné suivant les directions horizontales. On obtient un profil 1D selon z;
- 2. Deux bornes de concentration sont définies par l'utilisateur, par exemple  $c_1 = 0.3$  et  $c_2 = 0.7$ ;
- 3. On en déduit deux cotes  $z_1$  et  $z_2$  en lesquelles le profil moyenné de concentration atteint les valeurs bornes;



FIGURE C.1 – Comparaison du calcul des densités de probabilité effectuées sur une grille non-uniforme sans projection des données (rouge) et après projection des données sur une grille uniforme (vert). Gauche : densité de probabilité de la vitesse  $u_x$ . Droite : densité de probabilité de la concentration c.

- 4. Si on se situe en approximation de Boussinesq, les deux moitiés de la couche de mélange présentent une symétrie statistique. Si  $c_2 = 1 c_1$  alors la symétrie est imposée aux bornes  $z_1$  et  $z_2 : |z_1| = |z_2| = (|z_1| + |z_2|)/2$ ;
- 5. Les échantillons retenus sont tous les points situés entre ces deux cotes.

#### Calcul sur une grille non-uniforme

La méthode de calcul par noyaux suppose une répartition régulière des points de la grille. Si la répartition est irrégulière, alors certaines valeurs de la densité de probabilité sont surestimées. Il s'agit des valeurs prises par la fonction dans les zones où la densité de points est élevée. À l'inverse, les valeurs prises par la fonction dans les zones de points peu denses sont sous-estimées. Il est nécessaire de projeter les variables dont on souhaite calculer la densité de probabilité vers une grille régulière de points, avant d'appliquer la méthode des noyaux. La figure C.1 présente des calculs de densité de probabilité depuis des grilles irrégulières (donc des calculs erronés) et les mêmes calculs à partir d'une grille régulière (en fait les données irrégulières après projection sur une grille régulière). Les écarts pour la concentration sont nets. Dans la suite, les données de la grille irrégulière sont donc projetées par interpolation sur une grille régulière.

Considérons un maillage  $(N_x, N_y, N_z)$ . Les grandeurs sont interpolées suivant la seule direction à maillage irrégulier, à savoir z. On a donc  $N_x \times N_y$  vecteurs colonnes à interpoler. L'interpolation est effectuée dans l'espace physique et au moyen des polynômes de Lagrange. Soit  $(x_k), k = 1, \ldots, N_z$  la grille z irrégulière et  $(y_{ijk}), i = 1, \ldots, N_x, j = 1, \ldots, N_y, k = 1, \ldots, N_z$ les valeurs de la grandeur physique dont on souhaite calculer la densité de probabilité. On se donne une grille régulière  $(X_r), r = 1, \ldots, N_{reg}$ . Le nombre de points régulièrement répartis  $N_{reg}$  ne doit pas être trop faible; en effet on risquerait de sous-échantillonner la variable dans les zones où la densité de points de la grille irrégulière est élevée. Pour cette raison, on utilise un multiple du nombre de points de la grille irrégulière. Une grille régulière comprenant cinq fois plus de points que la grille irrégulière semble être un nombre adéquat. Un facteur dix n'apporte rien de plus, et un facteur trois détériore légèrement les queues des densités de probabilité comparé au facteur cinq.

La grandeur interpolée  $L_{ij}(X_r)$  s'exprime de la façon suivante :

$$L_{ij}(X_r) = \sum_{m=0}^{N_z} y_{ijm} \left( \prod_{\ell=0, \ \ell \neq m}^{N_z} \frac{X_r - x_\ell}{x_m - x_\ell} \right).$$
(C.4)

Cette interpolation est effectuée pour les points situés dans la couche de mélange, qui représentent environ 80-90% des points du maillage. L'entier  $N_z$  peut donc atteindre 700 ou 800. A ces niveaux, la formule d'interpolation pose des problèmes numériques. En cause, le nombre élevé de facteurs dans le produit : les erreurs d'arrondis s'amplifient.

Pour ces raisons, une limitation du nombre de points utilisés dans l'interpolation a été mise en place. Pour chaque point  $(X_r)$ ,  $r = 1, \ldots, N_{reg}$ , les  $N_{interp}$  points de la grille irrégulière qui sont les plus proches de  $X_r$  sont déterminés. On obtient  $N_{reg}$  doublets d'indices qui définissent l'ensemble des points utilisés pour l'interpolation des  $L_{ij}(X_r)$ ,  $r = 1, \ldots, N_{reg}$ . Notons  $J_{inf}^r$ et  $J_{sup}^r$  les indices des bornes des points du maillage irrégulier retenus pour l'interpolation de  $L_{ij}(X_r)$ . On a  $J_{sup}^r = J_{inf}^r + N_{interp} - 1$ . L'équation (C.4) se réécrit alors :

$$L_{ij}(X_r) = \sum_{m=J_{inf}^r}^{J_{sup}^r} y_{ijm} \left( \prod_{\ell=J_{inf}^r, \ \ell \neq m}^{J_{sup}^r} \frac{X_r - x_\ell}{x_m - x_\ell} \right).$$
(C.5)

Les tests ont montré que la valeur  $N_{interp} = 8$  donne de bons résultats.

## Bibliographie

- ALAUZET, F., FREY, P. J. & GEORGE, P. L. 2004 Anisotropic mesh adaptation for Rayleigh–Taylor instabilities. In 16th ECCOMAS (ed. P. Neittaanmäki and T. Rossi and S. Korotov and E. Oñate and J. Périaux and D. Knörzer). Jyväskylä (Finland). 22
- ANDREWS, M.J. & DALZIEL, S.B. 2010 Small Atwood number Rayleigh–Taylor experiments. *Phil. Trans. R. Soc. A* 368 (1916), 1663–1679. 15
- ANUCHINA, N.N., VOLKOV, V.I., GORDEYCHUK, V.A., ES'KOV, N.S., IIYUTINA, O.S. & KOZYREV, O.M. 2000 3D numerical simulation of Rayleigh–Taylor instability using MAH– 3 code. Laser and Particle Beams 18 (02), 175–181. 22
- ARROW, K., HURWICZ, L. & UZAWA, H. 1968 Studies in Nonlinear Programming. Stanford : Stanford University Press. 66
- BANERJEE, A., KRAFT, W.N. & ANDREWS, M.J. 2010 Detailed measurements of a statistically steady Rayleigh–Taylor mixing layer from small to high Atwood numbers. J. Fluid Mech. 659, 127–190. 17
- BANNON, P.R., CHAGNON, P.R. & JAMES, R.P. 2006 Mass conservation and the anelastic approximation. *Mon. Wea. Rev.* **134**, 2989–3005. 23
- BARRANCO, J.A. & MARCUS, P.S. 2006 A 3D spectral anelastic hydrodynamic code for shearing, stratified flows. J. Comput. Phys. 219, 353–365. 24
- BATOUL, A., KHALLOUF, H. & LABROSSE, G. 1994 Une méthode de résolution directe (pseudo-spectrale) du problème de Stokes 2D/3D instationnaire. Application à la cavité entrainée carrée. C. R. Acad. Sci. Paris, Série II 319, 1455–1461. 66
- BAYLISS, A., CLASS, A. & MATKOWSKY, B.J. 1995 Roundoff error in computing derivatives using the chebyshev differentiation matrix. J. Comput. Phys. 116 (2), 380–383. 93, 94
- BAYLISS, A. & MATKOWSKY, B.J. 1987 Fronts, relaxation oscillations and period doubling in solid fuel combustion. J. Comput. Phys. **71**, 147–168. 74
- BAZAROV, I.P. 1964 Thermodynamics. Macmillan. 28
- BELL, J.B., DAY, M.S., RENDLEMAN, C.A., WOOSLEY, S.E. & ZINGALE, M. 2004 Direct numerical simulations of type Ia supernovae flame. II. The Rayleigh–Taylor instability. *Astrophys. J.* 608, 883–906. 21
- BELOTSERKOVSKII, O. M. & OPARIN, A. M. 1999 Computational analysis of the specific features of a spatial progress of Rayleigh–Taylor instability. In *Proceedings of the 7th International Workshop on the Physics of Compressible Turbulent Mixing* (ed. E. Meshkov and Y. Yanilkin and V. Zhmailo), pp. 379–384. St. Petersburg. 22
- BERGER, M.J. & COLELLA, P. 1989 Local adaptive mesh refinement for shock hydrodynamics. J. Comput. Phys. 82 (1), 64–84. 24

- BERGER, M.J. & OLIGER, J. 1984 Adaptive mesh refinement for hyperbolic partial differential equations. J. Comput. Phys. 53 (3), 484–512. 24
- BHATNAGAR, P.L., GROSS, E.P. & KROOK, M. 1954 A model for collision processes in gases. I. small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. *Phys. Rev.* **94** (3), 511. 20
- BOFFETTA, G., MAZZINO, A., MUSACCHIO, S. & VOZELLA, L. 2009 Kolmogorov scaling and intermittency in Rayleigh–Taylor turbulence. *Phys. Rev. E* **79**, 065301R–4. 130, 137
- BOFFETTA, G., MAZZINO, A., MUSACCHIO, S. & VOZELLA, L. 2010 Statistics of mixing in three-dimensional Rayleigh–Taylor turbulence at low Atwood number and Prandtl number one. *Phys. Fluids* 25, 085107–17. 21, 129, 130
- BOUDESOCQUE-DUBOIS, C., CLARISSE, J.-M. & GAUTHIER, S. 2003 A spectral Chebyshev method for linear stability analysis of one-dimensional exact solutions of gas dynamics. J. Comput. Phys. 184, 592–618. 74
- BOYD, T.J.M. & SANDERSON, J.J. 2003 The physics of plasmas. Cambridge University Press. 1
- BRACHET, M.-E. 1991 Direct simulation of three-dimensional turbulence in the Taylor-Green vortex. Fluid Dyn. Res. 8, 1–4. 141
- BREIDENTHAL, R. 1981 Structure in turbulent mixing layers and wakes using a chemical reaction. J. Fluid Mech. 109, 1–24. 13
- CABOT, W.H. & COOK, A.W. 2006 Reynolds number effects on Rayleigh–Taylor instability with possible implications for type Ia supernovae. *Nat. Phys.* **2** (8), 562–568. 13, 21, 130, 131
- CABOT, W. & ZHOU, Y. 2013 Statistical measurements of scaling and anisotropy of turbulent flows induced by Rayleigh–Taylor instability. *Phys. Fluids* **25**, 015107–18. 21
- CALDER, A. C., DURSI, L. J., FRYXELL, B., PLEWA, T., WEIRS, V. G., DUPONT, T., ROBEY, H. F., KANE, J. O., DRAKE, R. P., REMINGTON, B. A., DIMONTE, G., HAYES, J., STONE, J. M., RICKER, P. M., TIMMES, F. X., ZINGALE, M. & OLSON, K. 2002 On validating an astrophysical simulation code. Astrophys. J. Suppl. Ser. 143, 201. 22
- CANUTO, C., HUSSAINI, M.Y., QUARTERONI, A. & ZANG, T.A. 1988 Spectral Methods in Fluid Dynamics. Berlin : Springer-Verlag. 66, 68, 69, 74
- CANUTO V.M. AND GOLDMAN I. 1985 Analytical model for large-scale turbulence. *Phys. Rev. Lett.* 54 (5), 430–433. 130
- CAO, N., CHEN, S. & DOOLEN, D. 1999 Statistics and structures of pressure in isotropic turbulence. *Phys. Fluids* 11, 2235–2250. 141
- CASNER, A., SMALYUK, V.A., MASSE, L., IGUMENSHCHEV, I., LIBERATORE, S., JACQUET, L., CHICANNE, C., LOISEAU, P., POUJADE, O., BRADLEY, D.K. et al. 2012 Designs for highly nonlinear ablative Rayleigh–Taylor experiments on the national ignition facility. *Physics of Plasmas (1994-present)* **19** (8), 082708. 3

- CELANI, A. 2007 The frontiers of computing in turbulence : challenges and perspectives. J. Turb. 8 (34), 1–9. 131
- CHASSAING, P., ANTONIA, R.A., ANSELMET, F., JOLY, L. & SARKAR, S. 2002 Variable Density Fluid Turbulence, fluid mechanics and its applications, vol. 69 edn. Dordrecht : Kluwer Academic Publishers. 31
- CHERTKOV, M. 2003 Phenomenology of Rayleigh–Taylor turbulence. *Phys. Rev. Lett.* **91**, 115001. 130
- CHORIN, A.J. 1968 Numerical Solution of the Navier-Stokes Equations. *Math. Comp.* 22, 745–761. 66
- COOK, A.W. 2009 Enthalpy diffusion in multicomponent flows. *Phys. Fluid* **21**, 055109. 26
- COOK, A.W. & CABOT, W.H. 2004 High-wavenumber viscosity for high-resolution numerical methods. J. Comp. Phys. 195, 594–601. 21
- COOK, A.W., CABOT, W. & MILLER, P. 2004 The mixing transition in Rayleigh–Taylor instability. J. Fluid Mech. 511, 333–362. 13, 21, 130, 131
- COOK, A.W. & DIMOTAKIS, P.E. 2001 Transition stages of Rayleigh–Taylor instability between miscible fluids. J. Fluid Mech. 443, 69–99. 21
- DALZIEL, S.B., LINDEN, P.F. & YOUNGS, D.L. 1999 Self-similarity and internal structure of turbulence induced by Rayleigh–Taylor instability. J. Fluid Mech. 399, 1–48. 15, 22, 150
- DIMONTE, G., YOUNGS, D. L., DIMITS, A., WEBER, S., MARINAK, M., WUNSCH, S., GARASI, C., ROBINSON, A., ANDREWS, M. J., RAMAPRABHU, P., CALDER, A. C., FRYXELL, B., BIELLO, J., DURSI, L., MACNEICE, P., OLSON, K., RICKER, P., ROSNER, R., TIMMES, F., TUFO, H., YOUNG, Y.-N. & ZINGALE, M. 2004 Comparative study of the turbulent Rayleigh–Taylor instability using high-resolution simulations : The Alpha-Group collaboration. *Phys. Fluids* 16, 1668–1692. 12
- DIMOTAKIS, P.E. 2000 The mixing transition in turbulent flows. J. Fluid Mech. 409, 69–98. 13, 131
- DUBIEF, Y. & DELCAYRE, F. 2000 On coherent-vortex identification in turbulence. J. Turb. 11, 1–22. 114
- DUFF, R.E., HARLOW, F.H. & HIRT, C.W. 1962 Effects of diffusion on interface instability between gases. *Phys. Fluids* 5, 417. 108, 109, 131
- DURRAN, D.R. 2008 A physically motivated approach for filtering acoustic waves from the equations governing compressible stratified flow. J. Fluid Mech. 59, 365–379. 24
- FERMIGIER, M., LIMAT, L.W.J.E.B.P., WESFREID, J.E., BOUDINET, P. & QUILLIET, C. 1992 Two-dimensional patterns in Rayleigh–Taylor instability of a thin layer. J. Fluid Mech. 236, 349–383. 14
- FOURNIER, E., GAUTHIER, S. & RENAUD, F. 2001 2d pseudo-spectral parallel Navier-Stokes simulations of compressible Rayleigh–Taylor instability. *Comput. & Fluids* **31**, 569. 22

- FRÖHLICH J. 1990 Résolution numérique des équations de Navier–Stokes à faible nombre de Mach par méthode spectrale. PhD thesis, Université de Nice-Sophia Antipolis. 37
- FRÖHLICH J. AND PEYRET R. 1990 Calculations of non-Boussinesq convection by a pseudospectral method. Comp. Meth. Appl. Mech. Eng. 80, 425–433. 83
- FRÖHLICH J., LAURE P. AND PEYRET R. 1992 Large departures from Boussinesq approximation in the Rayleigh–Bénard problem. Phys. Fluids A4, 1355–1372. 24, 36
- GAUTHIER, S. 1988 A spectral collocation method for two-dimensional compressible convection. J. Comput. Phys. 75, 217–235. 22
- GAUTHIER, S. 1991 A semi-implicit collocation method : Application to thermal convection in 2D compressible fluids. Int J. Numer. Methods Fluids 12, 985–1002. 22, 83
- GAUTHIER, S. 2013 Compressibility effects in Rayleigh–Taylor flows : influence of the stratification. Phys. Scr. T155, 014012–8. 10, 22, 164, 171
- GAUTHIER, S., GUILLARD, H., LUMPP, T., MALÉ, J.-M., PEYRET, R. & RENAUD, F. 1996 A Spectral Domain Decomposition Technique with Moving Interfaces for Viscous Compressible Flows. In *Proceedings of the Third ECCOMAS Computational Fluid Dynamics Conference* (ed. Désidéri J.-A., Hirsch C., Le Tallec P., Pandolfi M. and Périaux J.), pp. 839–844. Paris. 22
- GAUTHIER, S., LE CREURER, B., ABÉGUILÉ, F., BOUDESOCQUE-DUBOIS, C. & CLARISSE, J.-M. 2005 A self-adaptive domain decomposition method with Chebyshev method. Int. J. Pure Appl. Math. 24, 553–577. 22, 74, 75, 107, 131
- GEORGE, E. & GLIMM, J. 2005 Self-similarity of Rayleigh–Taylor mixing rates. *Phys. Fluids* 17, 054101–13. 22, 123, 171
- GLIMM, J., GROVE, J. W., LI, X., OH, W. & SHARP, D. 2001 A critical analysis of Rayleigh–Taylor growth rates. J. Comput. Phys. 169, 652–677. 22
- GLIMM, J., SHARP, D.H., KAMAN, T. & LIM, H. 2013 New Directions for Rayleigh–Taylor Mixing. Phil. Trans. R. Soc. A 371, 20120183–17. 134
- GOUGH, D.O. 1969 The anelastic approximation for thermal convection. J. Atmos. Sci. 26, 448–456. 23
- GRÉGOIRE, O. 1997 Modèle multiéchelle pour des écoulements turbulents compressibles en présence de forts gradients de densité. Thèse de l'Université de la Méditerrannée Aix-Marseille II. 130
- GUILLARD, H., MALÉ, J.-M. & PEYRET, R. 1992 Adaptive spectral methods with application to mixing layer computations. J. Comput. Phys. 102, 114–127. 74
- GUO, W., LABROSSE, G. & NARAYANAN, R. 2013 The Application of the Chebyshev-Spectral Method in Transport Phenomena. Lecture Notes in Computational and Applied Mechanics, 68. Berlin, Heidelberg : Springer-Verlag. 31, 69, 72

- HAMMOUCH, Z. 2012 Développement d'une méthode numérique pour les équations de navierstokes en approximation anélastique : application aux instabilités de Rayleigh–Taylor. PhD thesis, Université de Paris-Sud 11. 64, 68, 109, 160
- HAMMOUCH, Z., LABROSSE, G. & GAUTHIER, S. 2013 Anelastic Stokes eigenmodes in infinite channel. J. Sci. Comput. 55, 65–91. 34
- HECHT, J., OFER, D., ALON, U., SHVARTS, D., ORSZAG, S. A. & MCCRORY, R. L. 1995 Three-dimensional simulations and analysis of the nonlinear stage of the Rayleigh–Taylor instability. *Laser Part. Beams* 13, 423–440. 22
- HIRSCHFELDER, J.O., CURTISS, C.F. & BIRD, R.B. 1954 Molecular theory of gases and liquids. John Wiley & Sons, New York. 26, 28
- HUSER, G., CASNER, A., MASSE, L., LIBERATORE, S., GALMICHE, D., JACQUET, L. & THEOBALD, M. 2011 Reduced ablative Rayleigh–Taylor growth measurements in indirectly driven laminated foils. *Physics of Plasmas (1994-present)* 18 (1), 012706. 19
- INOGAMOV, N. A. & OPARIN, A. M. 1999 Comparison of evolution of 3D RT and RM hexagonal, square and triangular perturbations from linear stage to steady-state. In *Proceedings* of the 7th International Workshop on The Physics of Compressible Turbulent Mixing (ed. E. Meshkov and Y. Yanilkin and V. Zhmailo), pp. 259–265. St. Petersburg. 22
- ISHIHARA, T., GOTOH, T. & KANEDA, Y. 2009 Study of high-Reynolds number isotropic turbulence by Direct Numerical Simulation. Annu. Rev. Fluid Mech. 41, 165–180. 131
- IVEY, G.N., WINTERS, K.B. & KOSEFF, J.R. 2008 Density stratification, turbulence, but how much mixing? Annual Review of Fluid Mechanics 40 (1), 169. 171
- JACOBS, J.W. & CATTON, I. 1988a Three-dimensional Rayleigh-Taylor instability Part 1. weakly nonlinear theory. J. Fluid Mech. 187, 329–352. 19
- JACOBS, J.W. & CATTON, I. 1988b Three-dimensional Rayleigh-Taylor instability part 2. experiment. J. Fluid Mech. 187, 353–371. 19
- JEONG, J. & HUSSAIN, F. 1995 On the identification of a vortex. J. Fluid Mech. 285, 69–95. 113
- JIN, H., LIU, X.F., LU, T., CHENG, B., GLIMM, J. & SHARP, D.H. 2005 Rayleigh–Taylor mixing rates for compressible flow. *Physics of Fluids* 17 (2), 024104. 22
- JOLY, L., FONTANE, J. & CHASSAING, P. 2005 The Rayleigh–Taylor instability of twodimensionnal high-density vortices. J. Fluid Mech. 537, 415–431. 21
- KADAU, K., GERMANN, T.C., HADJICONSTANTINOU, N.G., LOMDAHL, P.S., DIMONTE, G., HOLIAN, B.L. & ALDER, B.J. 2004 Nanohydrodynamics simulations : an atomistic view of the Rayleigh–Taylor instability. *Proceedings of the National Academy of Sciences of* the United States of America 101 (16), 5851–5855. 20
- KALELKAR, C. 2006 Statistics of pressure fluctuations in decaying isotropic turbulence. *Phys. Rev. E* 73, 046301–10. 141

- KANEDA, Y. & YOSHIDA, K. 2004 Small-scale anisotropy in stably stratified turbulence. New J. Phys. 6 (34), 1–16. 141
- KIFONIDIS, K., PLEWA, T., SCHECK, L., JANKA, H.-T. & MÜLLER, E. 2006 Non-spherical core collapse supernovae. Astronomy and Astrophysics 453 (2), 661–678. 3
- KLEISER, L. & SCHUMANN, U. 1980 Treatment of the incompressibility and boundary conditions in 3-D numerical spectral simulation of plane channel flows. In Proc. 3th GAMM Conf. on Numerical Methods in Fluid Mechanics (ed. E.H. Hirschel), pp. 165–173. Vieweg, Braunschweig. 66
- LABROSSE, G. 2011 Méthodes spectrales : Méthodes locales, méthodes globales, problèmes d'Helmholtz et de Stokes, équations de Navier-Stokes. Paris : Ellipses, collection Technosup. 69, 73, 206
- LABROSSE, G. & REDONDO, A. 2011 The optimal 3-node preconditioner of the  $d^2/dx^2$ Fourier and Chebyshev spectral operators. J. Comput. Phys. 230, 147–158. 83
- LAFAY, M.-A. LE CREURER, B. & GAUTHIER, S. 2007 Compressibility effects on the Rayleigh–Taylor instability growth between miscible fluids. *Europhys. Letters* 79, 64002. 131
- LAFAY, M.A. 2008 Stabilité et simulation numérique de l'écoulement de Rayleigh–Taylor pour des fluides miscibles compressibles. PhD thesis, CEA-Université Paris-Sud 11. 86
- LANEY, D., BREMER, P.-T., MASCARENHAS, A., MILLER, P. & PASCUCCI, V. 2006 Understanding the structure of the turbulent mixing layer in hydrodynamic instabilities. Visualization and Computer Graphics, IEEE Transactions on 12 (5), 1053–1060. 14
- LAWRIE, A.G.W. & DALZIEL, S.B. 2011 Rayleigh–Taylor mixing in an otherwise stable stratification. J. Fluid Mech. 688, 507–527. 16, 171, 201
- LE CREURER, B. 2005 Simulations numériques pseudo-spectrales de l'instabilité de Rayleigh– Taylor pour des fluides compressibles. PhD thesis, CEA-Université de Marne-la-Vallée. 67, 68, 161
- LE CREURER, B. & GAUTHIER, S. 2008 A return toward equilibrium in a two-dimensional Rayleigh–Taylor flows instability for compressible miscible fluids. *Theor. Comput. Fluid* Dyn. 22, 125–144. 107, 111, 132
- LEE, T. & LIN, C.-L. 2005 A stable discretization of the Lattice–Boltzmann equation for simulation of incompressible two-phase flows at high density ratio. J. Comput. Phys. 206 (1), 16–47. 20
- LESIEUR M. 1997 Turbulence in Fluids. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht. 141, 180
- LI, X. L. 1993 Study of three-dimensional Rayleigh–Taylor instability in compressible fluids through level set method and parallel computation. *Phys. Fluids A* 5 (8), 336–342. 22
- LI, X. L. 1996 A numerical study of three-dimensional bubble merger in the Rayleigh–Taylor instability. *Phys. Fluids A* 2 (8), 1904–1913. 22

- LIN, Z., THIFFEAULT, J.-L. & DOERING, C.R. 2011 Optimal stirring strategies for passive scalar mixing. J. Fluid Mech. 675, 465–476. 139, 154, 190
- LINDEN, P.F., DALZIEL, S.B. & YOUNGS, D.L. 1994 Self-similarity and internal structure induced by Rayleigh–Taylor instability. J. Fluids Mech. pp. –. 22, 150
- LIU, X., GEORGE, E., WURIGEN, B. & GLIMM, J. 2006 Turbulent mixing with physical mass diffusion. *Phys. Rev. E* **73**, 056301–8. 22
- LIVESCU, D. 2013 Numerical simulations of two-fluid turbulent mixing at large density ratios and applications to the Rayleigh–Taylor instability. *Phil. Trans. R. Soc. A* **371** (2003), 20120185–23. 19, 39, 123
- LIVESCU, D. & RISTORCELLI, J.R. 2008 Variable-density mixing in buoyancy-driven turbulence. J. Fluid Mech. 605, 145–80. 21
- LIVESCU, D., RISTORCELLI, J.R., PETERSEN, M.R. & GORE, R.A. 2010 New phenomena in variable-density Rayleigh–Taylor turbulence. *Phys. Scr.* 2010 (T142), 014015. 14, 130
- LIVESCU, D., WEI, T. & PETERSEN, M.R. 2011 Direct numerical simulations of Rayleigh– Taylor instability. J. Phys. Conf. 318, 082007. 21
- LUMLEY, A. 1967 Similarity and the Turbulent Energy Spectrum. *Phys. Fluids* **10** (4), 855–858. 141
- MCCRACKEN, M.E. & ABRAHAM, J. 2005 Lattice–Boltzmann methods for binary mixtures with different molecular weights. *Phys. Rev. E* **71** (4), 046704. 21
- MCLAUGHLIN, R.M., ZHOU, H. & FOREST, G. 2003 Computational study of a weakly compressible mixing barrier in low Prandtl number, strongly stratified fluids. *Phys. Fluids* 15 (10), 2872–2885. 23
- MELLADO, J.P., SARKAR, S. & ZHOU, Y. 2005 Large-eddy simulation of Rayleigh–Taylor with compressible miscible fluids. *Phys. Fluid* **17**, 076101. 22, 123
- MONIN, A.S. & YAGLOM, A.M. 1975 Statistical fluid mechanics : Mechanics of turbulence, vol. 2, 874 pp. 142
- MUESCHKE, N.J. & SCHILLING, O. 2009a Investigation of Rayleig–Taylor turbulence and mixing using direct numerical simulation with experimentally measured initial conditions.
  I. Comparison to experimental data. *Phys. Fluids* 21, 014106–19. 21
- MUESCHKE, N.J. & SCHILLING, O. 2009b Investigation of Rayleigh–Taylor turbulence and mixing using direct numerical simulation with experimentally measured initial conditions.
   II. Dynamics of transitional flow and mixing statistics. *Phys. Fluids* 21, 014107–16. 21
- MUESCHKE, N.J., SCHILLING, O., YOUNGS, D.L. & ANDREWS, M.J. 2009 Measurements of molecular mixing in a high-Schmidt-number Rayleigh–Taylor mixing layer. J. Fluid Mech. 632, 17–48. 16, 17, 172
- OFER, D., SHVARTS, D., ZINAMON, Z. & ORSZAG, S. A. 1992 Mode coupling in nonlinear Rayleigh–Taylor instability. *Phys. Fluid B* 4, 3549–3561. 22

- OGURA, Y. & PHILLIPS, N.A. 1962 Scale Analysis of Deep and Shallow Convection in the Atmosphere. J. Atmos. Sci. 19, 173–179. 23
- OLSON, B.J. & COOK, A.W. 2007 Rayleigh–Taylor shock waves. *Physics of Fluids (1994-present)* **19** (12), 128108. 22, 23, 32, 47
- OLSON, D.H. & JACOBS, J.W. 2009 Experimental study of Rayleigh–Taylor instability with a complex initial perturbation. *Physics of Fluids* **21** (3), 34103. 18
- ORSZAG, S.A. 1980 Spectral methods for problems in complex geometries. J. Comput. Phys. 37, 70–90. 83, 85
- ORSZAG, S. & PATTERSON, G.S. JR. 1972 Numerical simulation of three-dimensional homogeneous isotropic turbulence. *Phys. Rev. Lett.* 28, 76–79. 131
- PEYRET, R. 2002 Spectral Methods for Incompressible Viscous Flow. New-York : Springer. 69, 72, 74, 75, 78, 81, 96
- PUMIR, A. 1994a A numerical study of pressure fluctuations in three-dimensional, incompressible, homogeneous, isotropic turbulence. *Phys. Fluids* 6 (6), 2071–2083. 141
- PUMIR, A. 1994b A numerical study of the mixing of a passive scalar in three dimensions in the presence of a mean gradient. *Phys. Fluids* 6 (6), 2118–2132. 154, 189
- RAMAPRABHU, P. & ANDREWS, M.J. 2004a Experimental investigation of Rayleigh–Taylor mixing at small Atwood numbers. J. Fluid Mech. 502, 233–271. 17
- RAMAPRABHU, P. & ANDREWS, M.J. 2004b On the initialization of Rayleigh–Taylor simulations. *Phys. Fluids* **16**, L59–L62. 21, 150
- RAMAPRABHU, P. & DIMONTE, G. 2005 Single-mode dynamics of the Rayleigh–Taylor instability at any density ratio. *Phys. Rev. E* **71**, 036314. 21
- RAMAPRABHU, P., DIMONTE, G. & ANDREWS, M. J. 2005 A numerical study of the influence of initial perturbations on the turbulent Rayleigh–Taylor instability. J. Fluid Mech. 536, 285–319. 21
- READ, K.I. 1984 Experimental investigation of turbulent mixing by Rayleigh–Taylor instability. *Physica D* 12, 45–58. 19
- REMINGTON, BRUCE 2014 Communication personnelle. 2
- RENAUD, F. & GAUTHIER, S. 1997 A dynamical pseudo-spectral domain decomposition technique : application to viscous compressible flows. J. Comput. Phys. 131, 89–108. 22, 75, 100
- RISTORCELLI, J.R. & CLARK, T.T. 2004 Rayleigh–Taylor turbulence : self-similar analysis and direct numerical simulations. J. Fluid Mech. 507, 213–253. 12, 21, 115, 129, 130, 133, 135, 141, 146
- SANDOVAL, D.L. 1995 The dynamics of variable-density turbulence. PhD thesis, University of Washington. 7, 13, 23, 38

- SCAGLIARINI, A., BIFERALE, L., SBRAGAGLIA, M., SUGIYAMA, K. & TOSCHI, F. 2010 Lattice–Boltzmann methods for thermal flows : Continuum limit and applications to compressible Rayleigh–Taylor systems. *Physics of Fluids (1994-present)* 22 (5), 055101. 21
- SCHNEIDER, N. 2012 Utilisation des techniques GPU/CPU pour l'accélération d'un code d'hydrodynamique pseudo-spectral. *rapport de stage de Master 2*. 101
- SCHNEIDER, N. & GAUTHIER, S. 2015a Asymptotic analysis of Rayleigh–Taylor flow for Newtonian miscible fluids. J. Eng. Math. 92 (1), 55–71. 26
- SCHNEIDER, N. & GAUTHIER, S. 2015b Visualization of Rayleigh–Taylor flows from Boussinesq approximation to fully compressible Navier-Stokes model. *Soumis*. 21, 112
- SCHNEIDER, N. & GAUTHIER, S. 2015c Vorticity and mixing in Rayleigh–Taylor Boussinesq turbulence. Soumis . 21, 129
- SCHNEIDER, N., HAMMOUCH, Z., LABROSSE, G. & GAUTHIER, S. 2015 A spectral anelastic Navier–Stokes solver for a stratified two-miscible-layer system in infinite horizontal channel. J. Comput. Phys. 299, 374–403. 21, 64, 132
- SHAN, X. & CHEN, H. 1993 Lattice–Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components. *Phys. Rev. E* 47 (3), 1815. 20
- SHE, Z.-S., JACKSON, E. & ORSZAG, S.A. 1990 Intermittent vortex structures in homogeneous isotropic turbulence. Nature 344, 226–228. 116, 137
- SHVARTS, D., ALON, U., OFER, D., MCCRORY, R.L. & VERDON, C.P. 1995 Nonlinear evolution of multimode Rayleigh–Taylor instability in two and three dimensions. *Phys. Plasmas* 2, 2465–2472. 22
- SIN'KOVA, O.G. et al. 1999 Numerical simulation of gravitational turbulent mixing of a light flat stratum with surrounding fluid. In Proceedings of the 7th International Workshop on the Physics of Compressible Turbulent Mixing (ed. Meshkov, E. and Yanilkin, Y. and Zhmailo, V.), pp. 428–437. St. Petersburg. 22
- SNIDER, D.M. & ANDREWS, M.J. 1994 Rayleigh–Taylor and shear driven mixing with an unstable thermal stratification. *Physics of Fluids (1994-present)* 6 (10), 3324–3334. 17
- SOUFFLAND, D., GREGOIRE, O., GAUTHIER, S. & SCHIESTEL, R. 2002 A two-time-scale model for turbulent mixing flows induced by Rayleigh–Taylor and Richtmyer–Meshkov instabilities. *Flow, turbulence and combustion* 69 (2), 123–160. 57, 130, 141
- SREENIVASAN, K.R. 1998 An update on the energy dissipation rate in isotropic turbulence. Phys. Fluids 10 (2), 528–529. 143
- STRIKWERDA J.C. 1977 Initial Boundary Value Problems for Incompletely Systems. Commun. Pure Appl. Math. 30, 797–822. 27
- TEMAM, R. 1969 Sur l'approximation de la solution de Navier-Stokes par la méthode des pas fractionnaires. I, II. Arch. Rat. Mech. Anal. **32**, 135–153,377–385. 66
- TRYGGVASON, G. 1983 Numerical experiment on slumping gravity current. In Geophysical Fluid Dynamics (ed. F.K. Mellor), vol. WHOI-83-41, pp. 207–228. 37

- VLADIMIROVA, N. & CHERTKOV, M. 2009 Self-similarity and universality Rayleigh–Taylor, Boussinesq turbulence. *Phys. Fluids* 21, 015102–9. 21, 115, 129, 130, 137
- WADDELL, J.T., NIEDERHAUS, C.E. & JACOBS, J.W. 2001 Experimental study of Rayleigh– Taylor instability : Low atwood number liquid systems with single-mode initial perturbations. *Phys. Fluids* **13** (5), 1263–1273. 19, 109, 110, 111, 112, 199
- YOUNG, Y. N., TUFO, H., DUBEY, A. & ROSNER, R. 2001 On the miscible Rayleigh–Taylor instability : two and three dimensions. J. Fluid Mech. 447, 377–408. 21, 115, 129, 130
- YOUNGS, D.L. 1984 Numerical simulation of turbulent mixing by Rayleigh–Taylor instability. *Physica D* **12**, 32–44. 22
- YOUNGS, D.L. 1991 Three-dimensional numerical simulation of turbulent mixing by Rayleigh-Taylor instability. *Phys. Fluids A* **3**, 1312–1320. 22
- YOUNGS, D.L. 2013 The density ratio dependence of self-similar Rayleigh-Taylor mixing. *Phil. Trans. R. Soc. A* **371**, 20120173–15. 22, 23, 131, 134
- YOUNGS, D.L. 2014 Direct numerical simulation and implicit large eddy simulation of Rayleigh–Taylor mixing. In *Présentation à la conférence Turbulent Mixing and Beyond*. 23
- ZEYTOUNIAN, R. 1990 Asymptotic Modeling of Atmospheric Flows. Berlin : Springer-Verlag. 37, 42, 45
- ZHANG, X. & TAN, D. 2009 Direct Numerical Simulation of the Rayleigh–Taylor, with the Spectral Element Method. *Chin. Phys. Lett.* 26 (8), 084703–4. 21
- ZINGALE, M., WOOSLEY, S.E., RENDLEMAN, C.A., DAY, M.S. & BELL, J.B. 2005 Threedimensional numerical simulations of Rayleigh–Taylor unstable flames in Type Ia supernovae. Astrophys. J. 632, 1021–1034. 21

#### Résumé

L'instabilité de Rayleigh-Taylor (IRT) est notamment rencontrée lors des expériences de Fusion par Confinement Inertiel, et son développement est un obstacle à la réussite de ces expériences. L'objet de cette thèse est d'étudier la croissance de l'IRT pour différents régimes de compressibilité, au moyen de simulations numériques directes réalisées à l'aide d'un code pseudo-spectral multidomaine de type Chebyshev-Fourier-Fourier.

La méthode du développement asymptotique permet d'établir des modèles à bas nombre de Mach pour lesquels la contribution acoustique est éliminée. L'implantation dans le code de simulation du modèle anélastique, qui met en jeu des fluides stratifiés et capture les effets thermiques, est améliorée. Le modèle de Boussinesq est ajouté au code. La précision de la méthode numérique est étudiée pour différents découpages en sous-domaines. Plusieurs éléments de validation sont présentés, dont la comparaison avec une expérience.

La première simulation présentée, réalisée avec le modèle de Boussinesq, s'intéresse à la croissance auto-semblable de l'IRT. Les lois d'échelle de la vorticité et de la dissipation sont dégagées. La structure de la turbulence et du mélange entre les deux fluides est discutée. Certaines propriétés de la turbulence homogène et isotrope sont retrouvées, mais on note la persistance d'anisotropie aux petites échelles. Les premières simulations 3D de l'IRT avec le modèle anélastique sont présentées. L'influence des effets de compressibilité sur les premières phases de la croissance est étudiée. En outre, une couche de mélange anélastique en faible stratification est analysée et présente des effets de compressibilité non négligeables.

**Mots-clés :** instabilité de Rayleigh-Taylor, modèles bas nombre de Mach, simulation numérique directe, turbulence développée, écoulements auto-semblables, écoulements compressibles.

#### Abstract

The Rayleigh-Taylor instability (RTI) is especially observed in inertial confinement fusion experiments, and its development prevents the success of these experiments. The purpose of this work is to study the growth of the RTI for different compressibility regimes by using a multidomain pseudospectral Chebyshev-Fourier-Fourier simulation code.

The asymptotic expansion method allows to establish several low Mach number models which do not contains acoustics. The implantation of the anelastic model, which deals with stratified fluids and captures thermal effects, has been improved. Moreover, the Boussinesq model is added to the simulation code. The accuracy of the entire numerical method is studied, as a function of the subdomain separation, and several validation elements are shown, including a comparison with an experimental study.

The first simulation to be analyzed is achieved with the Boussinesq model. We focus on the selfsimilarity of the RTI growth. The temporal scalings of vorticity and dissipation are displayed, and the structures of turbulence and mixing are discussed. Some properties of isotropic and homogeneous turbulence are observed, however some anisotropy remains at small scales. The first three-dimensional anelastic simulations are presented. The influence of compressibility effects on the first stages of the growth is studied. Finally, a developed anelastic mixing layer involving weakly stratified fluids is described and was found to display non-negligible compressibility effects.

**Keywords:** Rayleigh-Taylor instability, low Mach number models, direct numerical simulation, developed turbulence, self-similar flows, compressible flows.