Étude du mélange de scalaires en écoulement turbulent et application à la modélisation des petites échelles

1 Introduction

La grande majorité des écoulements de fluides (gaz et liquides) qui peuplent notre quotidien sont turbulents - c'est à dire soumis à des mouvements en apparence complètement désordonnés. Il en est ainsi de l'air qui nous entoure et de l'eau qui s'écoule dans les fleuves et les éviers et ceci n'est pas anodin. Au dix-neuvième siècle, un des précurseurs de la mécanique des fluides a émis la remarque que sans la turbulence, les fleuves couleraient sans doute à des vitesses excessivement importantes : la turbulence dissipe en effet d'une manière remarquablement efficace l'énergie cinétique (et donc la vitesse) d'un fluide. Les tourbillons de la turbulence se divisent en tourbillons de plus en plus petits, jusqu'à ce que la viscosité du fluide les fasse disparaître et avec eux une bonne partie de l'énergie cinétique. Un fluide turbulent est en ce sens "plus visqueux" qu'un fluide en écoulement régulier, sans tourbillons (on dit "laminaire").

Il serait bon d'ajouter que sans la turbulence, diluer un sucre dans un café prendrait énormément de temps, et qu'il serait presque impossible d'avoir un bain à une température qui soit à peu près la même partout. En effet, la multitude de tourbillons qui accompagne la turbulence permettent à la température ou à la concentration d'un colorant de devenir rapidement homogène : c'est le mélange turbulent. C'est ce phénomène qui, dans un moteur à explosion, mêle intimement air et carburant - et plus les deux sont mélangés, plus efficace est le moteur.

Le travail présenté ici concerne justement la simulation numérique du mélange turbulent. A cause de l'importance pratique du mélange turbulent, on comprend qu'obtenir des simulations fiables de ce phénomène soit d'une importance cruciale pour de nombreuses applications industrielles (moteurs en général ou réacteurs d'avions par exemple).

2 Simulations numériques directes

Parce que la turbulence et les phénomènes qui lui sont associés sont très complexes et très changeants, leur description se fait par des quantités statistiques (des moyennes, en gros). Bien que les équations qui décrivent la turbulence ou le mélange turbulent soient parfaitement connues, il reste difficile de prévoir toutes les quantités statistiques à partir de ces équations.

Avec l'avènement des ordinateurs, de nouvelles voies d'approche des problèmes de turbulence et de mélange turbulent se sont ouvertes. Les simulations numériques directes ont permis de recréer des écoulements virtuels en utilisant les équations fondamentales de la mécanique des fluides. Ces écoulements constituent des objets d'étude extrêmement dociles, car leurs caractéristiques sont modifiables à l'envi. Mieux, ces simulations donnent accès à la valeur de la vitesse, de la température, ou de la concentration d'une espèce chimique en n'importe quel point de l'espace, à n'importe quel moment. Elles permettent ainsi d'accéder à des grandeurs statistiques que l'expérience ne permet pas d'atteindre.

Le travail que j'ai mené est basé sur de telles simulations d'un colorant dans une turbulence (voir figure 2. Il s'agit d'un écoulement "cas d'école", mais qui permet la plus grande précision numérique possible (ce qui fut déterminant lors de cette étude). Nous allons voir quel est le comportement du scalaire, et comment il est caractérisé.

Dans une turbulence, le colorant est transporté par l'écoulement, et, de plus, il diffuse à l'intérieur de celui-ci. Cette diffusion est faible, ce qui fait que pour les grosses structures, elle est négligeable - de tels blocs ne s'homogénéisent que très lentement si on laisse la diffusion jouer seule. La turbulence a pour effet d'étirer et de replier ces structures, ce qui diminue leur taille. Ces nouvelles structures sont à leur tour étirées et repliées, et elles atteignent en fin de compte une taille à laquelle la diffusion commence à jouer un rôle important. A cette échelle, l'homogénéisation par la diffusion se fait enfin. Ce comportement n'est pas sans rappeler celui de la vitesse : il s'agit d'un phénomène de **cascade**.

Tant que la diffusion ne joue pas, il n'est pas possible de dire en regardant la façon dont les structures du colorant sont étirées à quelle échelle on se trouve. Autrement dit, en effectuant un zoom sur l'image, on aura l'impression de ne pas avoir vraiment changé d'échelle : la situation aura la même allure, statistiquement parlant, bien sûr. Cette propriété est appelée auto-similarité : elle est bien connue dans le cadre des courbes fractales et accompagne généralement les phénomènes de cascade. Elle se manifeste par une allure de loi de puissance des quantités statistiques, ce qu'on constate sur la figure 1.

Les simulations ont donc permis de montrer qu'un phénomène de cascade auto-similaire se manifeste effectivement pour le colorant. De plus, les grandeurs statistiques qui caractérisent ce comportement prennent des valeurs très proches de l'expérience. Ces résultats valident l'approche numérique, et permettent de placer une grande confiance dans les données qu'elle génère.

3 Simulation et modélisation

En réalité, les simulations numériques directes sont beaucoup trop gourmandes pour pouvoir simuler des situations d'un intérêt pratique réel. Les simulations effectuées pour ce travail ont demandé chacune une cinquantaine d'heures de calcul sur les machines vectorielles de l'IDRIS en utilisant plus d'une dizaine de Gigaoctets de mémoire pour les plus grandes résolutions.

C'est pourquoi d'autres types de simulations ont été imaginés, qui ne soient pas aussi gourmandes. Le principe est de renoncer à simuler la totalité des champs de vitesse du fluide ou de concentration du colorant, pour ne conserver que l'essentiel : cela peut être la moyenne statistique de l'écoulement ou ses grandes échelles. Nous allons nous concentrer un peu sur ce seconde type de simulation qu'on appelle Simulation des Grandes Échelles. Au cours du phénomène de cascade, les structures du champ de vitesse ou du colorant sont étirées, repliées, et perdent petit à petit la mémoire de la façon dont elles ont été créées. On s'attend donc à ce que les plus petites échelles présentent un comportement **universel**. Il est d'autre part possible de trouver les équations qui décrivent le comportement des grandes échelles à partir des équations fondamentales du problème. Seulement, certains termes ne peuvent pas se déduire de la connaissance des grandes échelles seules, car ils décrivent l'action des petites échelles. Comme ces dernières sont supposées avoir un comportement universel, on peut penser qu'il est possible d'estimer statistiquement leurs effets et que cette estimation aura la plus grande généralité. C'est tout le principe de ce type de simulation. Le même type de problème surgit si l'on veut simuler la moyenne de l'écoulement seulement : les fluctuations, qu'on ne simule pas, ont une grande influence sur le comportement de ladite moyenne.

En bref, il s'agit dans tous les cas d'estimer statistiquement des quantités considérées comme inconnues à partir de celles auxquelles on a accès. Ce faisant, on sait qu'on commettra une erreur. Par exemple, plusieurs écoulements peuvent avoir les mêmes grandes échelles. L'estimation que l'on fournira grâce aux grandes échelles seules de l'effet des petites échelles ne pourra donc pas être parfaitement correcte : il y a un effet différent par écoulement ! Ces estimations sont généralement appelées des modélisations : il s'agit bien souvent de transcrire mathématiquement une hypothèse que l'on emet sur le comportement d'une quantité donnée, et dont la validité ne peut être que statistique.

Les données générées par les simulations numériques directes permettent de jauger finement la validité de ces modélisations et des hypothèses qui les sous-tendent. Les simulations donnent en effet accès à toutes les données possibles sur l'écoulement, même si c'est dans une situation académique et restreinte spatialement.

4 Estimateurs optimaux

Nous allons nous intéresser ici à l'estimation d'un terme inconnu d'une équation d'évolution des grandes échelles. Cette estimation utilise comme paramètres des grandeurs qui se déduisent de la seule connaissance des grandes échelles. On recherche ainsi une fonction de ces paramètres qui donne une approximation du terme inconnu. Il existe une mesure de l'erreur que commet cette fonction, appelée *erreur quadratique*. On peut montrer qu'il n'y a qu'une seule fonction pour laquelle l'erreur quadratique est la plus petite possible, si les paramètres utilisés sont bien fixés. Cette fonction est appelée l'estimateur optimal. C'est le meilleur estimateur possible, même s'il commet toujours une certaine erreur (irréductible, toujours dûe au fait qu'il peut y avoir plusieurs petites échelles possibles pour des grandes échelles données).

Il existe un moyen d'approcher numériquement cet estimateur optimal, en utilisant les données des simulations numériques. Il s'agit des *réseaux de neurones*. Initialement, il furent développés de manière à mimer le comportement de réseaux de neurones réels, et pour executer des tâches particulières (comme la reconnaissance de forme, notamment). Depuis, des analyses théoriques très poussées ont été menées, qui ont changé la façon dont on peut les considérer. Ici, ils peuvent être utilisés de manière originale, pour approcher les estimateurs optimaux. Un réseau de neurone, prosaïquement, n'est qu'une fonction, qui à un ensemble d'entrées associe une sortie. On peut choisir de lui fournir comme entrée certains paramètres calculés à partir des grandes échelles, et de considérer la sortie comme étant la quantité à estimer. On présente au réseau *des données issues des simulations directes*, en lui “montrant” quelle sortie il faudrait associer dans l'idéal à quelle entrée. Le réseau s'adapte en modifiant les paramètres qui déterminent son comportement de manière à réduire l'erreur quadratique qu'il commet. Il s'approche ainsi des estimateurs optimaux.

Considérons un modèle d'une quantité α, basé sur un ensemble de paramètres π. Il devient possible grâce aux réseaux de neurones de savoir ce qu'on pourrait faire de mieux comme estimation avec le jeu de paramètres π. C'est l'erreur irréductible liée au choix des paramètres. En la comparant à l'erreur commise par le modèle, on peut savoir la marge de progression qui reste. Pour diminuer l'erreur commise par la modélisation, on peut être amené à changer de jeu de paramètres. Il devient possible grâce aux réseaux de neurones de comparer de manière absolue deux jeux de paramètres différents : il suffit de comparer les erreurs commises par les estimateurs optimaux. Cela renseigne sur la pertinence d'un paramètre, lorsqu'on l'ôte ou qu'on l'ajoute au jeu de paramètres.

L'utilisation d'estimateur optimaux (quitte à généraliser cette notion à des fonctions comme nous l'avons fait) permet de façon générale de séparer les effets des différentes hypothèses à la base d'un modèle. Il devient possible de jauger séparement leur validité. C'est ce que nous avons fait dans le cas d'un modèle particulier. Ce modèle est actuellement considéré comme la principale voie pour pouvoir prendre en compte des réactions chimiques dans les simulations des grandes échelles. Il s'articule autour d'une hypothèse principale (hypothèse beta), qui hélas n'est pas suffisante. On lui adjoint donc ce qu'on appelle un sous-modèle, qui vise à estimer la quantité encore inconnue nécessaire pour pouvoir utiliser la première hypothèse. Notre travail a permis de comprendre comment la seconde hypothèse émise (le sous-modèle) perturbe la première (le coeur du modèle lui-même). Les estimateurs optimaux permettent ainsi une meilleur compréhension du fonctionnement de la modélisation, et suggèrent des directions d'amélioration

: on sait maintenant que la première hypothèse ne doit absolument pas être remise en cause, mais qu'il faut travailler sur le sous-modèle.

Pour finir, en utilisant toujours une stratégie de minimisation systématique de l'erreur quadratique, il est possible d'apporter facilement des améliorations légères aux modèles, pour prendre en compte un comportement qui ne l'avait pas été. Nous avons proposé une modification assez mineure du sous-modèle évoqué ci-dessus, qui améliore sensiblement son acuité.

5 Conclusion et perspectives

Vouloir calibrer des modèles à partir de simulations numériques directes n'est pas en soi une nouveauté. L'originalité de ce travail réside dans la mise au point d'outils d'étude systématique (estimateurs optimaux et leur généralisation) et de leur application grâce aux réseaux de neurones et à des méthodes numériques d'une grande précision. Nous montré sur un cas particulier (un modèle relativement complexe et très utilisé) comment on pouvait utiliser ces notions, et quelle était leur portée. Il existe aujourd'hui des besoins très importants en matière d'outils numériques pour simuler des situations complexes comme celles où le mélange turbulent joue un rôle clé. Les méthodes utilisées ici ont donc a priori un grand potentiel.

Une perspective intéressante se dégage également de ce travail : celle d'un nouveau type de simulation, d'ores et déjà à la portée de nos moyens de calcul. Il est parfaitement possible d'envisager une simulation des grandes échelles dans laquelle les termes inconnus seraient estimés directement par des réseaux de neurones (ayant "appris" sur des données issues de simulations numériques directes). Ceux qui ont été entraînés pour approcher les estimateurs optimaux pour l'étude ci-dessus feraient parfaitement l'affaire. Des éléments théoriques laissent penser qu'utiliser des estimateurs optimaux permettrait d'avancer sur la voie d'une simulation des grandes échelles "idéale". Ce travail a en effet montré que l'acuité de ces estimateurs était, même pour les jeux de paramètres les plus simples, bien supérieure à celle des modèles analytiques classiques.

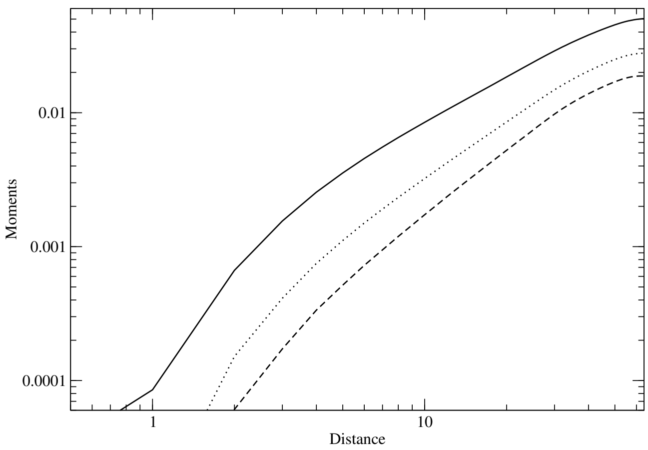

Figure 1: Fonctions de structure du “colorant” : différentes quantités statistiques présentant un comportement en loi de puissance, qui se signale ici par une portion linéaire

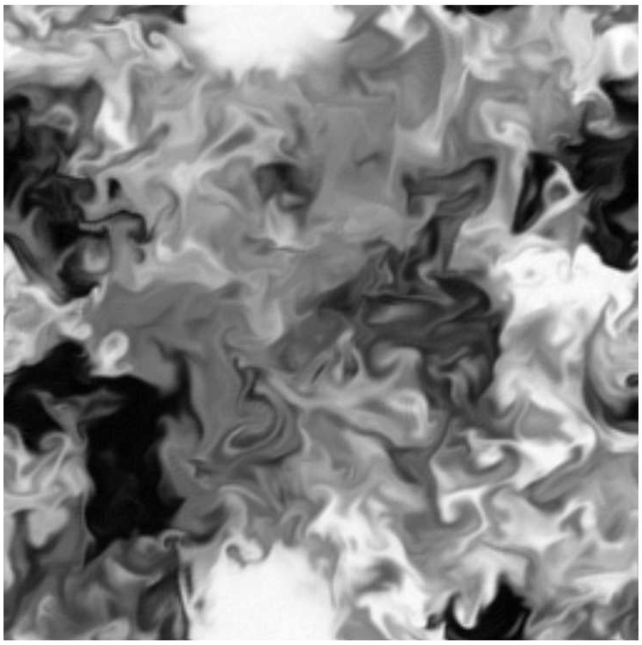

Figure 2: Une coupe du champ de concentration du colorant