

UNIVERSITÉ DE PERPIGNAN VIA DOMITIA

ECOLE DOCTORALE ENERGIE ENVIRONNEMENT
ED 305

Habilitation à Diriger des Recherches

Discipline : MÉCANIQUE, GÉNIE MÉCANIQUE, GÉNIE CIVIL

Option : Mécanique des fluides

M. Stéphane ABIDE

**SCHÉMAS COMPACTS :
UNE APPROXIMATION QUASI-LOCALE**

Habilitation soutenue publiquement le 16/09/2022 à Perpignan devant le jury composé de :

Rapporteurs

- O. Coutier-Delgosha** Professeur, Virginia Tech , Aerospace & Ocean Engineering, USA
E. Florentin Professeur, INSA Centre-Val de Loire, Laboratoire Gabriel Lamé
E. Lamballais Professeur, Université de Poitiers, Laboratoire Pprime

Examinateurs

- M. Barboteu** Professeur, Université de Perpignan Via Domitia, LAMPS
F. Bataille Professeure, Université de Perpignan Via Domitia, PROMES
P. Bruel Chargé de Recherche, CNRS Université de Pau et des Pays de l'Adour, LMAP
A. Tyliszczak Professeur, Czestochowa University of Technology, Poland
S. Viazza Maître de conférences HDR, Université d'Aix-Marseille, M2P2

TABLE DES MATIÈRES

1	Introduction générale	5
2	Les schémas compacts : une revue	9
2.1	Méthodes numériques pour les écoulements turbulents	9
2.1.1	Modèles mathématiques	9
2.1.2	Discrétisation temporelle	10
2.1.3	Algorithmes de projection	11
2.2	Éléments d'approximations spatiales	13
2.2.1	Sur la classification des discrétisations spatiales	13
2.2.2	Les volumes finis : l'archétype de l'approximation locale	14
2.2.3	Méthodes pseudo-spectrales : archétype de l'approximation globale	15
2.3	Les schémas aux différences finies compactes	17
2.3.1	Les schémas Hermitiens précurseurs des schémas compacts	17
2.3.2	Formulation des schémas compacts	19
2.3.3	Schémas compacts pour problèmes elliptiques	20
2.4	Vers une exploitation de la localité des schémas compacts	23
2.4.1	Schémas compacts ou approximations quasi-locales	23
2.4.2	Méthodes multidomaines	24
2.4.3	Un schéma de type boîte pour schémas compacts	26
2.5	Conclusion et démarche scientifique	27
3	Méthodes numériques	29
3.1	Évaluation parallèle des schémas compacts	29
3.1.1	La méthode reduced Parallel Diagonal Dominant	29
3.1.2	Qualification de la rPDD pour les écoulements incompressibles	31
3.2	Algorithme de diagonalisation successive parallèle	32
3.2.1	Algorithme de diagonalisation	32
3.2.2	Décomposition en pinceaux appliquée pour la diagonalisation successive	33
3.2.3	Extension aux coordonnées cylindriques	34
3.3	Préconditionnement des opérateurs elliptiques	35
3.3.1	Introduction	35
3.3.2	Analyse de la convergence	36
3.3.3	Problèmes elliptiques à coefficients constants	37
3.3.4	Problèmes elliptiques à coefficients variables	39
3.4	Vers un code recherche orienté Calcul Haute Performance	42
3.4.1	<i>HOC\$^3</i> un code de recherche	42

TABLE DES MATIÈRES

3.4.2	Éléments sur les performances	43
3.5	Conclusions et perspectives	45
4	Quelques simulations d'écoulements	47
4.1	Écoulements en milieux confinés	47
4.1.1	Cavité ventilée de <i>Nielsen</i>	47
4.1.2	Cavité à grand rapport de forme vertical	51
4.2	Instabilités strato-rotationnelles	54
4.2.1	Contexte et motivations	55
4.2.2	Modèle physique et configuration	55
4.2.3	Simulation de l'instabilité SRI	56
4.3	L'instabilité barocline en grande cavité	59
4.3.1	Contexte et motivations	59
4.3.2	Modèle mathématique et configuration géométrique	60
4.3.3	Quelques simulations de la cavité barocline	61
4.4	Conclusions et perspectives	65
5	Modélisation de problèmes non-réguliers	67
5.1	Des modèles de type Signorini	67
5.1.1	Loi de Signorini pour un modèle de matériau à changement de phase	67
5.1.2	Problèmes multi-contact en milieu granulaire	69
5.1.3	Condition de Signorini et fonction de complémentarité	71
5.2	Méthodes numériques	72
5.2.1	Méthode de Projection Itérative	72
5.2.2	Méthode Primal Dual Active Set	74
5.3	Simulations de problèmes avec condition de Signorini	75
5.3.1	Schémas compacts pour problèmes non-réguliers	75
5.3.2	Ecoulements granulaires	77
5.3.3	Simulations préliminaires diphasique fluides/particules	81
5.4	Conclusions et perspectives	84

CHAPITRE 1

INTRODUCTION GÉNÉRALE

Ce manuscrit est une synthèse de mes activités de recherche. Celles-ci s'articulent principalement autour de la simulation numérique en mécanique des fluides où je pense que ma principale contribution relève du développement des méthodes numériques dites de haute précision. Compte tenu de la diversité des écoulements multi-échelles étudiés (instabilités des écoulements soumis à la rotation jusqu'aux écoulements turbulents), mon principal objectif a été de réduire la durée des simulations, ou temps de restitution, qui s'avère très souvent prohibitive en dépit de l'augmentation continue de la puissance des calculateurs. Une des clés de voûte de ce travail repose sur l'approximation aux différences finies compactes. Cette famille de différences finies est désormais bien connue pour sa précision d'ordre supérieure aux différences finies centrées classiques mais également pour ses bonnes propriétés aux grands nombres d'onde. Ces bonnes propriétés sont assurées tout en préservant une localité qui permet sous certaines conditions une relative flexibilité en terme de parallélisation et du traitement numérique de modèles physiques complexes. Par ailleurs, mon intégration au sein du laboratoire LAMPS m'a offert l'opportunité d'une ouverture vers une thématique nouvelle pour moi, à savoir la mécanique du contact. Ce document a pour objectifs de décrire mes principales contributions dans ces différents domaines, mais également de mettre en évidence leurs limitations qui dès à présent orientent mes directions de recherche future.

Dans le cadre de la simulation des écoulements turbulents, les deux dernières décennies ont démontré que le calcul haute performance était désormais l'outil incontournable. A l'heure actuelle, les simulations les plus fines intègrent les équations de Navier-Stokes sur des maillages avec des dimensions de l'ordre de 18432^3 sur plusieurs milliers de processeurs (YEUNG et al., 2020). Ces simulations nécessitent la mise en œuvre de techniques de discréttisation compatibles avec les paradigmes de programmation parallèle actuels et futurs. Ces derniers reposent sur un modèle à grand nombre de "cores" pour lequel la problématique des communications entre processeurs est de première importance. Ce paradigme de parallélisation dit *parallélisme de données* est maintenant couramment exploité. Il consiste à modifier dynamiquement la distribution des données entre les processeurs afin de pouvoir appliquer un algorithme séquentiel (N. LI et al., 2010; PEKUROVSKY, 2012). Il est le point central du calcul distribué des transformées de Fourier. Ce parallélisme de données est particulièrement adapté aux discréttisations d'ordre élevé du fait de sa simplicité de mise en oeuvre.

On peut opposer à ce parallélisme de données, un *parallélisme algorithmique* se caractérisant par une distribution statique des données couplée à une parallélisation de l'algorithme de résolution. Cette approche de la parallélisation en mécanique des fluides numérique est généralement retenue lorsque des approximations locales (Volumes Finis, Différences Finies, Éléments Finis, méthodes de lattice Boltzmann ...) sont considérées. On peut citer par exemple la parallélisation du produit matrice/vecteur

à la base des solveurs itératifs ou encore les techniques de décomposition de domaines. Qu'une discré-tisation soit vue comme un produit matrice/vecteur ou comme l'application d'un opérateur discret sur un champ de données, la parallélisation de cette dernière repose finalement sur des communications locales. Pour ces discré-tisations, les volumes des communications sont inférieurs à ceux mis en jeu dans la parallélisation des données.

Comme déjà mentionné, un consensus se dégage dans la littérature concernant l'avantage de l'utilisation de discré-tisations d'ordre élevé ou d'approximations globales, pour la simulation d'écoulements multi-échelles (instabilités ou turbulence). Pour les discré-tisations les plus communes, comme les méthodes spectrales (CANUTO et al., 2012) ou les schémas aux différences finies compactes (LELE, 1992), leur nature globale conduit à une parallélisation de type de données. La réduction du volume de communications apparaît alors comme un levier opportun permettant de réduire les temps de rés-titution d'une simulation.

Par conséquent, la démarche scientifique de mes travaux de recherche a consisté à étudier com-ment les schémas compactes permettent de concilier à la fois précision numérique et haut degré de parallélisme dans un contexte de modélisation complexe relevant de problèmes non-séparables. Le fil conducteur de ces recherches repose sur la localité de l'approximation des schémas compactes qui se "situe" entre les approximations locales et globales, respectivement associées aux différences finies classiques et aux méthodes spectrales.

Ce travail a débuté durant ma thèse effectuée sous la direction de S. Viazzo et C. Solliec (ABIDE et al., 2005). L'objet de ces recherches concernait la simulation d'un écoulement turbulent de type jet plan en impact sur un obstacle. L'originalité portait sur l'utilisation des schémas aux différences finies compactes dans un contexte de géométrie "complexe". Une approche par décomposition de domaine et matrice d'influence fut alors retenue. Afin de tirer avantage de solveurs mono-domaines éprouvés, tels que la méthode de diagonalisations successives, une technique de matrice d'influence a été développée permettant d'assurer la continuité des champs de vitesse et de pression aux interfaces de la décom-position géométrique. La qualification et la validation de l'algorithme de projection multidomaine ont alors fait l'objet de différents cas tests : solution de Taylor-Green, cavité entraînée, écoulement en aval d'une marche descendante, écoulement instationnaire autour d'un barreau de section carrée et écoulement turbulent pleinement développé dans une conduite de section carrée démontrant l'effica-cité et la robustesse de la méthode développée, ainsi que son aptitude à appréhender des écoulements turbulents par simulation directe (ABIDE et al., 2005). La nature même de l'algorithme a permis alors une parallélisation sur quelques dizaines de processeurs. Par la suite, cette méthode a été étendue aux géométries annulaires (OGUIC et al., 2015) et mise en oeuvre dans le cadre de plusieurs études (ALIZARD et al., 2012 ; ŽNIDARČIČ et al., 2019).

Dans la continuité de mes travaux de thèse, j'ai souhaité m'orienter vers le calcul haute per-formance en animant le Centre de Calcul Intensif des Pays de la Loire, puis en implémentant, pour le compte du CEA, deux discré-tisations volumes finis pour milieux fortement anisotropes. Durant cette période professionnelle au CEA, il s'agissait de réaliser la parallélisation des volumes finis diamants et symétriques (ABIDE et al., 2007) dans l'environnement TRIO-U dédiée à l'étude de phénomènes de transport pour des matrices fortement anisotropes. Contrairement au travail de thèse, l'approximation locale par Volumes finis a permis d'exploiter des solveurs linéaires itératifs sur des architectures de calcul haute performance avec plusieurs centaines de processeurs.

Lors de mon intégration au LAMPS en 2008, j'ai intégré la thématique de l'efficacité énergé-tique relevant du Groupe Mécanique Énergétique alors animé par B. Zeghamti. Ainsi, mes travaux de recherche m'ont conduit à étudier les transferts thermiques et massiques en milieux confinés. Ma

contribution fut alors le développement d'un solveur Navier-Stokes incompressible de type volume d'ordre 2 tout en permettant aux étudiants de se former par la recherche à la mécanique des fluides numérique (CHABANI et al., 2017 ; CHESNEAU et al., 2011 ; DEROUICH et al., 2018 ; KHERBACHE et al., 2017 ; TOVONDRAINY et al., 2017). En parallèle de cette activité, j'ai souhaité poursuivre mes travaux sur la thématique des approximations d'ordre élevé, à savoir les schémas aux différences finies compactes. L'angle d'attaque fut alors différent de celui de mes travaux de thèse puisque je me suis focalisé sur la nature locale de l'approximation par schémas compacts. L'idée sous-jacente était de permettre une parallélisation efficace sans introduire d'interfaces qui peuvent localement perturber les propriétés de l'approximation considérée. Les premières applications concluantes relatives à la résolution des équations de Navier-Stokes ont été réalisées dans le cadre de la thèse de M. S. BINOUS (2017). Nous avons proposé des solveurs approchés pour l'évaluation des schémas compacts ainsi qu'une méthode de diagonalisation parallèle basée sur une décomposition en pinceaux (ABIDE, BINOUS et al., 2017 ; M. S. BINOUS, 2017). Du point de vue de la parallélisation, l'approche proposée repose à la fois sur un parallélisme algorithmique et de données. Cette première approche a trouvé son champ applicatif au travers de collaborations relevant de la thématique des écoulements stratifiés (DOUKKALI et al., 2018) et soumis à la rotation (ABIDE et al., 2018 ; MELETTI et al., 2021). Néanmoins, la technique de diagonalisation successive parallèle révèle un coût algorithmique important ainsi qu'un manque de souplesse. Ces éléments m'ont conduit à rechercher des alternatives basées en particulier sur le préconditionnement des opérateurs elliptiques pour les schémas compacts (ABIDE & ZEGHMATI, 2017 ; ABIDE, 2020 ; ABIDE et al., 2012).

Un second aspect de mes activités de recherche concerne la simulation numérique en mécanique du contact. Il s'agit d'une thématique de notre laboratoire notamment portée par M. Barboteu et S. Sofonea, dans laquelle j'ai contribué à l'encadrement des thèses de D. DANAN (2016) et S. CHERKAOUI (2021). Un des aspects fondamental en mécanique du contact demeure la modélisation et la résolution numérique du contact entre deux solides. Les modèles les plus communément utilisés formalisent le contact par des conditions aux limites s'exprimant sous la forme d'inégalités. Dans le cadre de la thèse de D. DANAN (2016), nous avons proposé une méthode active set pour la résolution numérique du contact entre un solide déformable et une fondation rigide. Par la suite, une extension de cette méthode aux milieux granulaires a été réalisée durant le travail de thèse de S. CHERKAOUI (2021), en intégrant un aspect calcul haute performance.

Le présent mémoire est composé de quatre chapitres. Le premier chapitre présente le contexte de mon travail qui s'inscrit principalement dans le domaine de la simulation des écoulements incompressibles multi-échelles. Une discussion amenant à une présentation du caractère quasi-local de l'approximation des schémas compacts y est notamment proposée. Elle conduit à l'orientation et la définition de mes directions de recherche liées à la mise en oeuvre des schémas compacts. Le chapitre 3 détaille deux stratégies de parallélisation des schémas compacts. La première exploite la nature locale de ces derniers pour l'évaluation des dérivées et interpolations. La deuxième est une stratégie de parallélisation de la méthode de diagonalisation successive basée sur la décomposition en pinceaux. Ce chapitre présente également une alternative à la méthode de diagonalisation fondée sur le préconditionnement des opérateurs elliptiques. Le chapitre 4 est consacré aux applications illustrant la mise en oeuvre des méthodes développées au chapitre 3 sur quelques simulations. Des simulations d'écoulements en milieu confiné et stratifié soumis à la rotation y sont présentées. Le chapitre 5 présente une synthèse de mon activité de recherche en lien avec la mécanique du contact. Les aspects liés à la non régularité de la mécanique du contact peuvent être numériquement traités notamment à l'aide des schémas compacts pour le problème de Signorini, ou encore dans le cas des écoulements diphasiques fluide/particules.

CHAPITRE 2

LES SCHÉMAS COMPACTS : UNE REVUE

Ce chapitre introduit la problématique de la discréétisation des équations de Navier-Stokes à l'aide de schémas aux différences finies compacts. Dans un premier temps, les techniques numériques pour la simulation de ces écoulements sont rappelées. Ensuite, les notions d'approximation spatiale locale et globale sont illustrées, ainsi que leurs impacts sur les stratégies de parallélisation. Enfin, les schémas compacts sont introduits pour souligner la diversité de cette famille de discréétisation. Un point particulier concerne les difficultés associées au traitement des opérateurs elliptiques. De ces discussions, il découle le qualificatif *approximation quasi-locale* qui à mon sens caractérise les schémas compacts. En m'appuyant sur ces notions, je détaille ma démarche scientifique autour des schémas compacts pour le calcul haute performance et la modélisation de problèmes de complexité croissante. Bien que ce chapitre soit introductif, la réflexion menée ici s'appuie sur la littérature et mes travaux de recherche initiaux qui ont orientés mes activités de recherche.

2.1 Méthodes numériques pour les écoulements turbulents

La simulation numérique des écoulements turbulents présente des spécificités inhérentes à la correcte approximation des phénomènes multi-échelles tout en économisant la ressource informatique. D'un point de vue pratique, cela se traduit par le choix d'un algorithme de découplage vitesse/pression efficace et d'un schéma temporel d'intégration pertinent. Ces techniques numériques sont rappelées ci-après afin de définir le cadre de ce mémoire.

2.1.1 Modèles mathématiques

Le cadre applicatif de ce travail est celui des écoulements incompressibles et faiblement compressibles. Les deux modèles mathématiques sont donc rappelés ci-après. Soit D un domaine formé d'un parallélépipède dans lequel siège l'écoulement d'un fluide incompressible et Newtonien de viscosité ν . L'écoulement est alors modélisé par les équations de Navier-Stokes incompressible :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2.1)$$

$$\partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \nu \nabla \nabla \mathbf{u} \quad (2.2)$$

où \mathbf{u} , p sont les champs de vitesse et de pression. Les conditions aux limites sont les conditions usuelles d'adhérence à la paroi, de périodicité ou de sortie. On soulignera le rôle spécifique de la variable de pression qui n'obéit pas à une loi d'évolution mais à une contrainte cinématique.

Le second modèle d'écoulement retenu dans ce travail (ABIDE, 2020 ; CHABANI et al., 2017) est celui dit à bas nombre de Mach. Ce modèle repose sur un développement asymptotique du paramètre γM^2

des équations de Navier-Stokes compressibles. Le filtrage acoustique résultant de ce développement permet une relaxation de la contrainte de stabilité temporelle tout en autorisant une variation de la masse volumique. Il est souvent considéré comme une alternative à l'hypothèse de Boussinesq pour les écoulements en convection naturelle ou plus généralement à masse volumique variable. Parmi les différentes formulations possibles présentées par KNIKKER (2011), celle proposée par NICLOUD (2000) a été retenue. La formulation mathématique résultante est proche du modèle incompressible avec une particularité sur la divergence, qui est non-nulle :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{\gamma - 1}{\gamma P_0} \nabla \cdot \left(-\kappa \nabla T - \frac{1}{\gamma - 1} d_t P_0 \right) \quad (2.3)$$

$$\partial_t \rho \mathbf{u} + \nabla \rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} = -\nabla p + \nabla \cdot \tau \quad (2.4)$$

$$\rho C_p (\partial_t T + \mathbf{u} \nabla T) = \nabla \kappa \nabla T + d_t P_0 \quad (2.5)$$

$$r \rho \partial_t T = P_0 \quad (2.6)$$

P_0 est appelée pression thermodynamique et dépend exclusivement du temps t . On note la densité ρ , la température T et C_p , κ , μ et γ correspondent aux propriétés thermophysiques usuelles. Les propriétés thermo-physiques μ , κ varient avec la température contrairement aux coefficients de capacité calorifique C_p . Le choix de ce modèle est motivé par les problèmes elliptiques non-séparables résultant de la discréétisation temporelle du système (2.3). En effet, un traitement numérique efficace de ce dernier reste encore un problème ouvert pour les discréétisations d'ordre élevé.

Dans les deux formulations, la résolution numérique consiste en l'approximation d'équations d'évolution par un champ cinématique contraint par sa divergence. Les algorithmes de projection sont alors une approche communément retenue pour traiter numériquement cette contrainte. Cette technique est rappelée au paragraphe suivant.

2.1.2 Discréétisation temporelle

La simulation des écoulements turbulents nécessite un échantillonnage temporel important pour correctement décrire les fluctuations des champs cinématiques et scalaires. La discréétisation temporelle des équations de Naviers-Stokes introduit au plus deux contraintes de stabilité respectivement associées aux termes convectifs et visqueux. Le critère de stabilité visqueux peut devenir très restrictif pour les écoulements en présence de parois et à grand nombre de Reynolds. En effet, la condition de CFL visqueuse varie quadratiquement avec le pas d'espace $\Delta t = \sigma \Delta x^2$ (σ dépendant du schéma temporel). Quant au critère de stabilité convectif, il impose le choix d'un pas de temps proportionnel au pas d'espace $\Delta t = \sigma \Delta x$. Compte tenu du caractère instationnaire des phénomènes étudiés, une discréétisation explicite des termes convectifs semble alors préférable à un solveur non-linéaire. Pour l'ensemble des travaux présentés dans ce mémoire, le choix d'une discréétisation temporelle semi-implicite prévaut. Plus spécifiquement, les schémas semi-implicites de Crank-Nicolson/Adams-Bashforth, Crank-Nicolson/Runge Kutta ou Euler rétrograde d'ordre 2 ont été mis en œuvre (ABIDE, BINOUS et al., 2017 ; ABIDE, 2020 ; ABIDE et al., 2018 ; MELETTI et al., 2021). Sans nuire à la généralité, on présente les grandes lignes de la discréétisation temporelle en utilisant le schéma d'Euler du premier ordre. Pour un modèle d'écoulement incompressible, le système semi-discréétisé conduit alors à :

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0 \quad (2.7)$$

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} + \mathbf{u} \nabla \mathbf{u}^n = -\nabla p^{n+1} + \nabla^2 \mathbf{u}^{n+1} \quad (2.8)$$

$$\frac{T^{n+1} - T^n}{\Delta t} + \mathbf{u}^n \nabla T^n = \nabla \alpha_T \nabla T^{n+1} \quad (2.9)$$

Pour le modèle faiblement compressible (KNIKKER, 2011 ; NICOUD, 2000) on est amené à considérer :

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = \frac{\gamma - 1}{\gamma P_0^{n+1}} \nabla \cdot \left(-\kappa^{n+1} \nabla T^{n+1} - \frac{1}{\gamma - 1} d_t P_0^{n+1} \right) \quad (2.10)$$

$$\frac{\rho^{n+1} \mathbf{u}^{n+1} - \rho^n \mathbf{u}^n}{\Delta t} + \nabla(\rho \mathbf{u})^n \otimes \mathbf{u}^n = -\nabla p^{n+1} + \nabla \cdot \tau^{n+1} \quad (2.11)$$

$$\rho^n C_p \frac{T^{n+1} - T^n}{\Delta t} + \rho^n C_p \mathbf{u}^n \nabla T^n = \nabla \kappa^n \nabla T^{n+1} + d_t P_0^{n+1} \quad (2.12)$$

$$r \rho^{n+1} T^{n+1} = P_0^{n+1} \quad (2.13)$$

Les deux systèmes d'équations semi-discrets conduisent à des équations d'évolution pour les champs de vitesse et un couplage avec la pression dynamique. Parmi les techniques de découplage des champs de vitesse et de pression (Uzawa, projection diffusion), l'approche classique de projection a été retenue dans l'ensemble de mes travaux. Les principaux éléments sont détaillés ci-après.

2.1.3 Algorithmes de projection

Le traitement numérique du couplage vitesse/pression reste encore un point délicat pour la simulation numérique des écoulements turbulents incompressibles. Il existe des configurations pour lesquelles il est possible d'éliminer la variables de pression. La formulation $\psi - \omega$ 2d ou encore vitesse-vorticité pour le canal plan sont des exemples. Il est possible de formuler la pression comme satisfaisant une équation d'évolution et non plus une contrainte cinématique. Les méthodes lattice-Boltzmann, de compressibilité artificielle privilégient ainsi cette équation d'évolution, simplifiant la résolution des équations de Navier-Stokes. Les méthodes d'Uzawa, de matrice d'influence et de splitting (projection) sont des approches où l'on cherche à imposer une contrainte spatiale sur la divergence du champ de vitesse. Notre travail repose exclusivement sur les algorithmes de projection, pour lesquels BROWN et al. (2001) présente une analyse détaillée. Une analyse comparative de différents solveurs incluant les algorithmes de projection est menée par KNIKKER (2011) pour les écoulements à bas Mach. Mes travaux m'ont conduit à expérimenter le schéma de Chorin (ABIDE et al., 2005), l'algorithme de projection modifié (ABIDE et al., 2018) pour les écoulements en géométries annulaires, ou le schéma plus classique dit de correction de pression (ABIDE, BINOUS et al., 2017). Ce dernier est détaillé ci-après.

La première étape consiste à évaluer une vitesse intermédiaire \mathbf{u}^\star à partir de l'équation de quantité de mouvement :

$$\mathbf{u}^\star - \nu \nabla^2 \mathbf{u}^\star = \mathbf{u}^n + \Delta t (-\nabla p^n - \mathbf{u} \nabla \mathbf{u}^n) \quad (2.14)$$

$$\mathbf{u}^\star \cdot \mathbf{n} = u_b \quad (2.15)$$

Ce champ de vecteur vitesse ne vérifie pas la contrainte de divergence nulle. Cette dernière est imposée via une correction de la vitesse de type :

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^\star - \Delta t \nabla \phi \quad (2.16)$$

où ϕ est la correction de pression. Elle est solution du problème de Poisson :

$$\nabla \cdot \nabla \phi = \frac{1}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}^\star \quad (2.17)$$

$$\nabla \mathbf{u}^\star \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (2.18)$$

La pression est alors mise à jour par :

$$p^{n+1} = p^n + \phi \quad (2.19)$$

Une adaptation de cette méthode pour le modèle à bas nombre de Mach est proposée par NICoud (2000). Bien que des approches plus récentes aient été proposées, j'ai conservé celle de Nicoud dans mes travaux (ABIDE, 2020; CHABANI et al., 2017) que je détaille ci-après.

Dans un premier temps, le champ de température est déterminé en résolvant l'équation d'énergie sous forme non-conservative :

$$\rho^n C_p \mathbf{T}^{n+1} - \nabla \cdot \kappa \nabla \mathbf{T}^{n+1} = \rho^n C_p \mathbf{T}^n + \Delta t (-\mathbf{u}^n \nabla \mathbf{T}^n + d_t P_0^n) \quad (2.20)$$

Pour les domaines fermés, le bilan intégral de la divergence thermique et de l'équation d'état permet de déterminer la pression thermodynamique ainsi que son taux de variation.

$$d_t P_0^{n+1} = \int_D \kappa \nabla T^{n+1} dv \quad (2.21)$$

$$P_0 = \frac{m_0}{\int_D \kappa r / T^{n+1} dv} \quad (2.22)$$

La densité ρ est alors déterminée grâce à l'équation d'état $\rho^{n+1} = P_0^{n+1} / r T^{n+1}$. A ce stade, il convient de déterminer le champ de vitesse à l'instar du cas incompressible, mais en respectant cependant une nouvelle contrainte cinématique :

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = \frac{\gamma - 1}{\gamma P_0^{n+1}} \left[\nabla \kappa \nabla T^{n+1} - \frac{1}{\gamma - 1} d_t P_0^{n+1} \right] \quad (2.23)$$

Cette contrainte est imposée dans l'étape de projection et formulée par le problème elliptique suivant :

$$\nabla \frac{1}{\rho^{n+1}} \nabla \phi = \frac{1}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}^* - \nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} \quad (2.24)$$

$$\partial_{\mathbf{n}} \phi = 0 \quad (2.25)$$

suivie de l'étape de correction de vitesse et de mise à jour de la pression :

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* - \Delta t \frac{1}{\rho} \nabla \phi \quad (2.26)$$

$$p^{n+1} = p^n + \phi \quad (2.27)$$

Dans le cas incompressible, l'avancement temporel des équations de Navier-Stokes se réduit à l'évaluation des opérateurs discrets de dérivation et du calcul de solutions pour des problèmes elliptiques à coefficients constants. Pour le cas quasi-incompressible, la masse volumique variable introduit des difficultés spécifiques lors des étapes de prédiction de vitesse et de correction de pression. Les problèmes obtenus ne sont plus séparables. Pour les deux modèles incompressible et quasi-incompressible, on peut isoler trois catégories de problèmes :

1. l'évaluation des termes explicites : $\mathbf{u} \nabla \mathbf{u}^n$,
2. la prédiction de la vitesse intermédiaire : $\frac{\rho}{\Delta t} \mathbf{u} - \nabla \mu \nabla \mathbf{u} = s$,
3. le calcul de la correction de pression : $-\nabla \frac{1}{\rho} \nabla \phi = s$.

L'évaluation des termes explicites, nommée dans ce mémoire *évaluation d'opérateurs*, correspond au calcul des dérivées et interpolations intervenant dans la discréttisation temporelle des termes convectifs ou diffusifs. La prédiction de la vitesse intermédiaire relève de la résolution d'équations aux dérivées partielles elliptiques ou *problème d'Helmholtz* :

$$\kappa \phi - \nabla \cdot \mu \nabla \phi = s \quad (2.28)$$

où κ et μ sont des coefficients constants pour le traitement du modèle incompressible et variables dans celui du cas quasi-incompressible. La correction de pression relève aussi de la résolution de problèmes elliptiques ou *problème de Poisson* :

$$-\nabla \cdot \beta \nabla \phi = s \quad (2.29)$$

où β est constant ou variable selon le modèle retenu. Pour le problème de Poisson, des conditions aux limites de type Neumann sont appliquées sur l'ensemble de la frontière du domaine. Il en résulte une solution définie à une constante additive près, c'est le problème de Poisson *singulier*.

2.2 Éléments d'approximations spatiales

Cette section, illustre l'impact du caractère local ou global d'une approximation spatiale sur les stratégies de parallélisation et la souplesse des solveurs. Pour ceci, je m'appuie sur mes travaux portant sur la parallélisation de méthodes de type volumes finis et des méthodes pseudo-spectrales. En premier lieu, je fournis les éléments de classification des discrétisations spatiales.

2.2.1 Sur la classification des discrétisations spatiales

Il est usuel de classifier les discrétisations spatiales par leur précision numérique, faisant ainsi référence à une *qualité* de l'approximation. Selon la nature de l'approximation, on parle d'erreur de troncature ou d'estimation d'erreur introduisant la notion d'ordre. En toute généralité, on associe l'ordre 2 aux familles d'approximation que sont les volumes finis, les éléments finis et les différences finies. A l'opposé, les discrétisations spectrales ou pseudo-spectrales possèdent une précision numérique supérieure qui se manifeste par une décroissance exponentielle de l'erreur numérique. Entre ces deux grandes familles, il est possible de classer les discrétisations de précision *intermédiaire*. Les éléments spectraux (PATERA, 1984) (Spectral Element Method), les méthodes de Galerkin discontinue (ARNOLD et al., 2002) (Discontinuous Galerkin) ou les schémas Hermiens (COLLATZ, 1960) entrent dans cette famille. En pratique, cette notion de convergence se traduit par *la traditionnelle* convergence en maillage.

La simulation des écoulements turbulents introduit une mesure différente de la qualité d'approximation. La gamme d'échelles inhérente à la turbulence nécessite des maillages importants conduisant souvent à des simulations en limite de la sous-résolution. Aux petites échelles, les interactions entre les dissipations numérique et physique définissent une sorte de *zone grise* rendant techniquement complexe la convergence en maillage au sens de l'erreur de troncature. La figure 2.1 extraite de l'article (HOKPUNNA et al., 2010) illustre cette notion de zone grise aux grands nombres d'onde.

On préfère alors juger de la convergence en maillage par l'analyse spectrale, ou d'une manière équivalente, en caractérisant la performance d'une approximation par sa capacité de résolution aux grands nombres d'onde. Ainsi, la dérivation première à l'aide de schémas compacts nécessite 5 fois moins de degrés de liberté que les différences finies d'ordre 2 (WILSON et al., 2001) pour une représentation acceptable de l'erreur en résolution. L'approximation spectrale est plus performante car une résolution équivalente est obtenue avec 15 fois moins de degrés de liberté. Le comportement du spectre à haute fréquence de la figure 2.1 est une manifestation caractéristique de cette notion de résolution.

Enfin, une autre classification peut être proposée si on analyse les approximations numériques sous l'angle purement informatique. Ainsi, une approximation

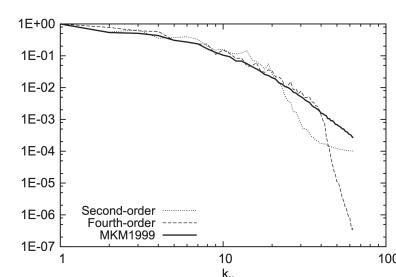


FIGURE 2.1 – Spectre unidimensionnel longitudinal de la composante de vitesse longitudinale en canal turbulent $Re_\tau = 180$.

peut se définir comme une relation d'adjacence. Les schémas standards (Volumes Finis, Différences Finies, Éléments Finis, Lattice Boltzmann Method) sont représentés comme des relations d'adjacence de faible profondeur, i.e. n'introduisant que ses voisins immédiats. Par exemple, le nombre de voisins est fixé à 4 pour des Différences Finies Centrées en 2d. Pour les EF/VF, ce nombre de voisins n'est à priori pas connu mais reste faible car il résulte de la topologie du maillage non-structuré. Ceci découle de la nature locale des approximations (interpolation linéaire ou quadratique par morceaux) dont est issu ce type d'approximations. Les méthodes pseudo-spectrales et spectrales sont basées sur une représentation en polynômes trigonométriques qui par nature, sont des approximations globales. Cette spécificité induit alors une adjacence de profondeur égale aux nombres de degrés de liberté et une topologie de voisin régulière. L'extension multidimensionnelle se fait alors par des produits tensoriels (LYNCH et al., 1964). Entre ces deux extrêmes, il est possible de classer d'autres schémas de la littérature, comme les schémas DRP (TAM et al., 1993) ou les schémas compacts (LELE, 1992). La stratégie de parallélisation et les performances résultent de cette classification.

Dans le paragraphe suivant, j'illustre la notion d'approximation locale en présentant un travail d'implémentation que j'ai réalisé avec des Volumes Finis dans l'environnement parallèle TRIOU (ABIDE et al., 2007).

2.2.2 Les volumes finis : l'archétype de l'approximation locale

De nombreux solveurs en mécanique des fluides ou des milieux déformables s'appuient sur des approximations locales. La discréétisation de ces problèmes conduisent à des systèmes linéaires creux pour lesquels de nombreux solveurs performants existent (LU, Krilov, multigrille). Dans ce cadre, j'ai implémenté un module de convection/diffusion pour les milieux poreux à l'aide du noyau parallèle TRIOU¹. La problématique était celle de la diffusion de radionucléides dans les couches géologiques profondes pour la gestion de déchets radioactifs par enfouissement. Le modèle mathématique central dans ce type d'application est une équation elliptique de la forme :

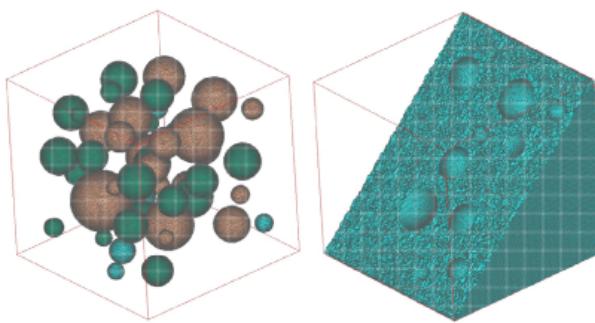
$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla \cdot \overline{\overline{D}} \nabla u \quad (2.30)$$

avec $u(x, t)$ la solution recherchée, $\overline{\overline{D}}$ un tenseur symétrique défini positif. La condition initiale $u_0(x) = u(x, t)$ est donnée, et des conditions aux limites de type Dirichlet ou Neumann sont imposées. Cette équation a été discréétisée avec les volumes symétriques et les volumes finis VF-DIAM (COUDIÈRE et al., 1999 ; LE POTIER, 2005). Ces schémas possèdent des propriétés de monotonie sur des mailles et pour des tenseurs de diffusion fortement anisotropes. Le schéma n'est pas reporté dans ce mémoire. Le lecteur peut se référer aux articles (COUDIÈRE et al., 1999 ; LE POTIER, 2005) ou au rapport (ABIDE et al., 2007). A l'instar de la plupart des approximations locales, un schéma temporel d'intégration implicite couplé à la discréétisation VF de l'équation (2.30) sur un volume de contrôle Ω_p conduit à :

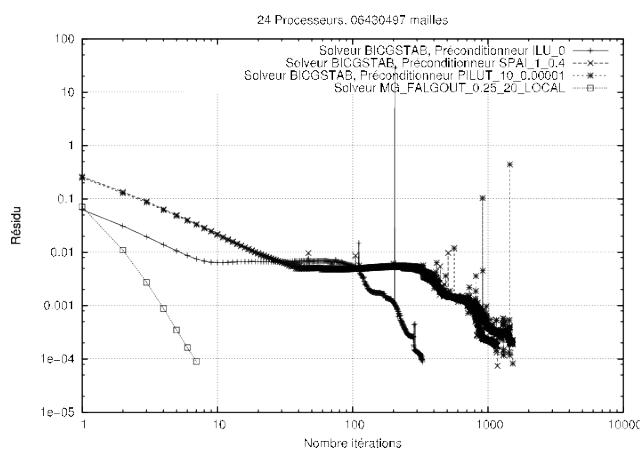
$$\frac{\Omega_p}{\Delta t} u_p^{n+1} - \left(A_p u_p^{n+1} + \sum A_{nei} u_{nei}^{n+1} \right) = \frac{\Omega_p}{\Delta t} u_p^n \quad (2.31)$$

où nei référence les voisins de l'inconnue u_p , Ω_p étant le volume de la cellule de contrôle. La parallélisation dans cette approche repose exclusivement sur celle du solveur linéaire. Pour les méthodes itératives telles que Krylov ou multigrille, une composante centrale de la parallélisation est l'évaluation des produits matrice/vecteur. Cette stratégie de parallélisation repose alors sur les communications entre les cellules adjacentes aux interfaces de la partition du maillage. Cela induit un volume de données échangé entre les différents processeurs relativement modéré et équilibré. La figure 2.2 présente des illustrations de ce travail de parallélisation. Le cas présenté est celui du transfert de masse dans une matrice cimentaire contenant des inclusions de matériau hétérogène. Le ratio entre les coefficients

1. actuellement TRIO CFD



(a) Matrice cimentaire avec inclusions.



(b) Courbes de résidus pour plusieurs solveurs itératifs.

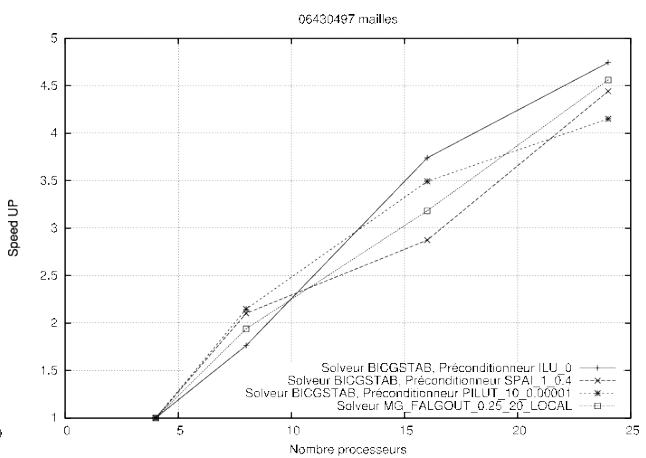

 (c) Courbes de *strong-scaling*.

FIGURE 2.2 – Transfert massique dans une matrice cimentaire.

de diffusion massique des inclusions est de 7 ordres de magnitude, et le maillage est constitué d'environ 6 millions de mailles. La figure 2.2b présente le nombre d'itérations nécessaire pour assurer la convergence du problème stationnaire. La figure 2.2c présente le speed-up relatif sur une plage de 4 à 24 processeurs qui se révèle être tout à fait convenable.

La parallélisation des volumes finis reste l'archétype de la stratégie d'une *parallélisation algorithmique* qui exploite la localité des données. Cette démarche est commune à de nombreux logiciels de CFD tels que OpenFOAM², NOTUS-CFD³, MFIX-EXA⁴. Il s'agit là aussi d'un trait commun aux logiciels de type éléments finis (GetFem). Ainsi, en simulation numérique de la turbulence les problèmes elliptiques résultant de l'algorithme de projection peuvent être discréétisés avec ce type d'approche. Cela permet de simuler de nombreux problèmes en géométries complexes, le parallélisme contribuant à réduire les temps de restitution. En pratique la convergence en maillage, et plus particulièrement en nombre d'onde, est souhaitée, ce qui nécessite d'employer un grand nombre de degrés de liberté. Une alternative est alors l'utilisation de discréétisations d'ordre élevé, limitant cependant les configurations simulées : géométries simples, conditions aux limites particulières. Le paragraphe suivant illustre la problématique de la parallélisation des approximations d'ordre élevé en s'appuyant sur les méthodes pseudo-spectrales.

2.2.3 Méthodes pseudo-spectrales : archétype de l'approximation globale

La nature locale des différences finies ou des volumes finis induit des techniques de parallélisation conduisant à un schéma de communications locales. Dans ce cas, les performances sont principalement

2. <https://www.openfoam.com/>
3. <https://notus-cfd.org/>
4. <https://mfix.netl.doe.gov/>

tributaires du solveur linéaire, avec pour référence de solveur optimal les méthodes multigrilles. Le fondement de la méthode des éléments finis et des méthodes spectrales repose sur celui de l'approximation d'un espace de solutions admissibles. Ainsi, les méthodes spectrales s'appuient sur des fonctions à support global, permettant ainsi d'obtenir une convergence rapide des approximations numériques lorsque les fonctions sont suffisamment régulières. En comparaison aux approximations à support local, les méthodes spectrales sont limitées à des géométries simples et possèdent une complexité algorithmique supérieure. Ayant utilisé ce type d'approche à plusieurs reprises pour discréteriser des domaines périodiques (ABIDE et al., 2018; DOUKKALI et al., 2018; MELETTI et al., 2021) je présente succinctement les points importants. Considérons un domaine périodique 1d, $[0, 2\pi[$ sur lequel est défini le problème elliptique suivant :

$$-u'' + \kappa u = s \quad (2.32)$$

La solution recherchée étant périodique et suffisamment régulière alors sa série de Fourier converge :

$$u(x) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \hat{u}_k \exp(ikx) \quad (2.33)$$

L'approximation à la fréquence de coupure N se note :

$$u_N(x) = \sum_{k=-N/2}^{+N/2} \hat{u}_k \exp(ikx) \quad (2.34)$$

L'ensemble des fonctions $\{\exp(ikx), k \in \mathbb{Z}\}$ est une famille orthogonale pour le produit scalaire $(u, v) = \int uv dx$. La solution du problème elliptique revient alors à déterminer les coefficients spectraux \hat{u}_k par :

$$(k^2 + \kappa) \hat{u}_k = \hat{s}_k \quad (2.35)$$

Le coût de la solution repose alors intégralement portée sur le calcul des transformées de Fourier. La forme matricielle des transformées de Fourier (CANUTO et al., 2012) est donnée par :

$$\begin{pmatrix} \hat{u}_{-N/2} \\ \vdots \\ \hat{u}_k \\ \vdots \\ \hat{u}_{N/2} \end{pmatrix} = \frac{1}{N+1} \begin{pmatrix} & & & & \begin{pmatrix} u_0 \\ \vdots \\ u_j \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix} \\ \cdots & e^{-i\omega_N k j} & \cdots & & \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \begin{pmatrix} u_0 \\ \vdots \\ u_j \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} & & & & \begin{pmatrix} \hat{u}_{-N/2} \\ \vdots \\ \hat{u}_0 \\ \vdots \\ \hat{u}_{N/2} \end{pmatrix} \\ \cdots & e^{i\omega_N k l} & \cdots & & \end{pmatrix} \quad (2.36)$$

Ce formalisme matriciel n'est jamais mis en oeuvre en pratique, mais il permet d'illustrer la notion de support global. On préfère recourir aux transformées de Fourier rapides d'une complexité algorithmique en $N \log N$ pour effectuer les changements de base. La parallélisation de ces algorithmes associés aux approximations globales repose sur une parallélisation des données : la décomposition en pinceaux (N. LI et al., 2010; PEKUROVSKY, 2012). La parallélisation d'un code série nécessite un effort modéré car l'algorithme séquentiel est identique, la seule modification importante étant la procédure de transposition des données. C'est le concept de *parallélisation des données*. Les premières applications de parallélisation des FFT utilisaient une décomposition de domaine 1D ou *slab decomposition*. Avec cette décomposition, les données 3D sont distribuées sur une grille 1D de processeurs. La direction décomposée peut être reconstruite par une ou deux transposées globales qui redistribuent les données entre les processeurs, rendant possible l'application d'algorithmes séquentiels tels que les FFT, les solveurs par plan...

Une limitation de cette décomposition 1d est que le nombre de points le plus faible des 3 directions correspond au nombre maximum de CPU utilisable. Une alternative est alors la décomposition *pencil*,

ou en pinceaux qui utilise une grille 2D de processeurs. Cette approche est couramment utilisée pour le calcul des transformées de Fourier sur des architectures à mémoire distribuée. Elle supporte le caractère global des transformées de Fourier au travers d'une utilisation intensive de communications collectives globales *MPI_ALLTOALL*. Une bonne maîtrise des performances de ces communications collectives peut s'avérer très technique (YEUNG et al., 2020) et donc on peut être conduit à limiter le nombre d'appels à la redistribution dynamique des données, en favorisant un maillage collocatif par exemple.

2.3 Les schémas aux différences finies compactes

Cette section présente tout d'abord une revue bibliographique illustrant la diversité des approximations aux différences finies de type compact. Les schémas compacts développés selon LELE (1992) y sont détaillés ainsi que les difficultés techniques inhérentes à la discrétisation des opérateurs elliptiques.

2.3.1 Les schémas Hermitiens précurseurs des schémas compacts

Historiquement, les méthodes d'ordre élevé avaient pour objectif de pallier l'absence ou les faibles ressources informatiques disponibles. Ainsi dès les années 60, la précision des méthodes spectrales a permis de réaliser les premières simulations de la turbulence homogène isotrope. Il est possible de se faire une idée des ressources informatiques disponibles : ORSZAG et al. (1972) rapportent une durée de 30 s par itération temporelle pour une résolution de 64^3 . Antérieurement, COLLATZ (1960) *soucieux de limiter ses efforts calculatoires* illustre le potentiel des ordres élevés en calculant la déformée d'une poutre soumise à une charge. Dans un premier temps, COLLATZ (1960) calcule une solution à l'aide de différences finies centrées d'ordre 2 sur deux maillages de 3 et 5 points pour en déduire par extrapolation la déformation au centre la poutre. Le calcul effectif consiste à résoudre un système tridiagonal de dimension 5. Il proposa alors un schéma aux différences finies original, possédant une erreur de troncature au quatrième ordre et dont la discrétisation résulte en un système tridiagonal comme les différences finies centrées d'ordre 2. Les détails reportés dans son manuscrit laissent à penser que les calculs sont réalisés manuellement, légitimant l'ordre 4 pour minimiser le nombre d'opérations. A ma connaissance, il s'agit là d'une des premières formulations publiées d'un schéma compact.

En général, l'accroissement de la précision numérique au sens de l'erreur de troncature est communément associée à une molécule de calcul plus large. L'intuition de COLLATZ (1960) est reportée ci-dessous : “The gain in accuracy over the ordinary method is obtained, not by including more pivotal values, as in the method of higher approximation, but by basing the derivation of each individual difference equation on the fact that the differential equation is satisfied at several point, rather than just one as in the other methods.”

Cette idée conduit ainsi à introduire les dérivées successives comme des inconnues supplémentaires : on parle alors de schémas *Hermitiens* ou de *Mehrstellen*. La relation aux différences s'exprime alors sous la forme suivante (COLLATZ, 1960 ; PEYRET et al., 1983) :

$$\sum_{-K}^K a_p u_{i+p} + b_p u'_{i+p} + c_p u''_{i+p}$$

En s'inspirant de cette technique, les travaux précurseurs (CIMENT et al., 1978 ; E. KRAUSE et al., 1976 ; LECOINTE et al., 1984 ; ROUX et al., 1978), mettent en oeuvre des variantes du schéma original de Collatz. Les applications concernaient alors la détermination de couche limite turbulente, ou d'écoulements laminaires à l'aide de la formulation $\psi - \omega$. Dans l'ensemble de ces travaux, la volonté de conserver une structure algébrique tridiagonale est fortement marquée. En formulation $\psi - \omega$, la méthode "Alternate Direction Implicit" est le principal solveur considéré afin que la formulation

unidimensionnelle sous-jacente reste discrétisée sur 3 points.

L'article *fédérateur* de LELE (1992), aborde entre autres les schémas Hermitiens sous l'angle de la résolution en nombre d'ondes. Il isola une famille de schémas Hermitiens pour l'étendre à d'autres opérateurs comme l'interpolation ou la dérivation sur une grille décalée. Il montre alors par une analyse en nombre d'onde que cette classe de schéma se "comporte comme" les méthodes spectrales. Il est à souligner que ce résultat s'obtient en augmentant la dimension de la molécule de calcul, s'éloignant de l'idée originale de COLLATZ (1960). Le travail de LELE (1992) est sans conteste une référence dans le domaine des discrétisations d'ordre élevé et généralement le terme schéma compact y fait référence. De nombreuses variantes ont été développées avec comme ligne directrice l'accroissement de la précision et l'amélioration de la résolution tout en minimisant la taille des molécules de calcul. Je présente ci-après une revue de quelques variantes de schémas compacts afin d'illustrer leur diversité.

Par exemple, HIXON (2000) proposa une variante permettant d'accroître la précision numérique tout en conservant une molécule de calcul de petite taille. Cette famille de schémas repose sur la formulation d'un schéma implicite interprété comme la somme de deux schémas implicites et décentrés. L'ordre 4 est alors obtenu par résolution de deux systèmes linéaires bidiagonaux, et l'ordre 6 en résolvant deux systèmes tridiagonaux. Dans ce dernier cas, le schéma repose sur trois points comme pour des schémas compacts de LELE (1992) d'ordre 4. Ces schémas sont souvent utilisés dans le domaine de l'aéroacoustique en raison d'un bon comportement aux hautes fréquences. Les schémas compacts ont aussi été étendus aux écoulements présentant des discontinuités. Dans ce cas, la difficulté relève du traitement du phénomène de Gibbs et de la positivité du schéma inhérent aux schémas d'ordre élevé. Les schémas ENO et WENO (JIANG et al., 1996) ont été développés à cet effet avec la particularité d'un décentrement fonction de la régularité de la solution. Elles souffrent souvent d'une mauvaise résolution spectrale et d'une dissipation numérique excessive. PIROZZOLI (2002) et ADAMS et al. (1996) ont ouvert une voie avec les méthodes hybrides schémas compacts et ENO/WENO, qui restent encore en développement actif. A l'instar des schémas DRP de TAM et al. (1993), les schémas compacts permettent certaines optimisations. Ainsi, il est possible de déterminer une famille de schémas compacts ayant un comportement hyper-visqueux en introduisant une viscosité numérique aux plus hauts nombres d'onde (DAIRAY et al., 2017). Le lecteur familiarisé avec ces méthodes notera que la revue précédente ne pointe pas le délicat problème de la discrétisation et de la résolution des problèmes elliptiques. Il sera traité dans la section 2.3.3. Les schémas présentés ici sont associés à une discrétisation temporelle explicite. Dans ce contexte la parallélisation des schémas compacts se fait selon de trois approches.

Une première stratégie de parallélisation pour l'évaluation des schémas compacts est identique à celle utilisée pour le calcul distribué des transformées de Fourier : la décomposition en pinceaux (N. LI et al., 2010; PEKUROVSKY, 2012). Elle a été adaptée au cas des schémas compact par LAIZET et al. (2009) et reste couramment utilisée pour la parallélisation des schémas compacts. Aucune approximation n'est introduite, mais le coût informatique de la distribution dynamique est à considérer, notamment pour les architectures GPU. Une seconde technique de parallélisation favorise un schéma de communications locales en considérant des zones de recouvrement aux interfaces pour lesquelles sont développés des schémas compacts décentrés (KIM et al., 2012; SENGUPTA et al., 2007). Les auteurs de ces méthodes notent que le décentrement à l'interface peut introduire des oscillations qu'il convient de maîtriser avec un filtrage adapté. La troisième approche, celle adoptée dans ce manuscrit, repose sur la résolution parallèle de systèmes tridiagonaux ou pentadiagonaux. Il s'agit de l'opération élémentaire pour l'évaluation des schémas compacts. Elle consiste à isoler les inconnues aux interfaces et à résoudre le système linéaire tridiagonal de manière exacte ou approchée (SUN, 1995). Pour l'inversion approchée, la qualité de l'approximation résulte de l'importance du terme de la diagonale dominante. On note que cette technique de parallélisation n'introduit qu'une cellule de recouvrement : on respecte ainsi le caractère local des schémas compacts. Cette méthode est un aspect important de mon travail et par conséquent sera détaillée au chapitre 2.

2.3.2 Formulation des schémas compacts

Cette section détaille la formulation des schémas compacts de l'article de LELE (1992). Soit un intervalle $[a, b]$ et sa grille dite *collocative* $\mathcal{G}_f = \{x_i \mid x_i = a + (i - 1)h, 1 \leq i \leq N\}$ uniforme de pas $h = (b - a)/N$. Associons à ce maillage une grille dite *décalée* définie par les centres des cellules de la grille collocative. $\mathcal{G}_c = \{x_{i+1/2} \mid x_{i+1/2} = x_i - h/2, 1 \leq i \leq N\}$. Ce type de grille décalée est ce que l'on appelle la disposition entrelacée ou *staggered grid*. Elle est utilisée pour éliminer les modes parasites de pression pour les solveurs incompressibles (FERZIGER et al., 2002). On introduit alors les approximations par les notations $u_i, u_{i+1/2}$ ainsi que les dérivées u'_i et $u'_{i+1/2}$. En conservant les notations de LELE (1992), les schémas compacts pour les opérateurs de dérivation décalée et d'interpolation sont définis par :

$$\beta u'_{i-2} + \alpha u'_{i-1} + u'_i + \alpha u'_{i+1} + \beta u'_{i+2} = a \frac{u_{i+1/2} - u_{i-1/2}}{h} + b \frac{u_{i+3/2} - u_{i-3/2}}{2h} + c \frac{u_{i+5/2} - u_{i-5/2}}{3h} \quad (2.37)$$

et

$$\beta \bar{u}_{i-2} + \alpha \bar{u}_{i-1} + \bar{u}_i + \alpha \bar{u}_{i+1} + \beta \bar{u}_{i+2} = a \frac{u_{i+1/2} + u_{i-1/2}}{2} + b \frac{u_{i+3/2} + u_{i-3/2}}{2} + c \frac{u_{i+5/2} + u_{i-5/2}}{2} \quad (2.38)$$

Les coefficients α, β, a, b et c sont alors déterminés par un développement en série de Taylor selon l'ordre de l'erreur de troncature souhaitée (LELE, 1992). J'ai principalement utilisé les schémas d'ordre 4 et 6 (ABIDE, 2020 ; ABIDE et al., 2005 ; ABIDE et al., 2018) dans lesquels je détaillerai aussi les relations frontières nécessaires à leur fermeture. On notera que dans l'article (ABIDE, 2020) des schémas d'ordre 8 et 10 ont également été employés avec un domaine périodique. Elles ne sont cependant pas reportées dans le présent manuscrit. Le lecteur peut se reporter à ces articles.

Indépendamment du schéma considéré, l'évaluation d'un opérateur discret requiert la solution d'un système linéaire de la forme :

$$MU' = BU \quad (2.39)$$

où M et B résultent respectivement des membres de gauche et de droite de la relation (2.37), et avec $U = \{u_i, 1 \leq i \leq N\}$ et $U' = \{u'_i, 1 \leq i \leq N\}$. Ce qui peut être formellement réécrit sous la forme matricielle suivante :

$$U' = M^{-1}BU = \delta^{cf}U \quad (2.40)$$

Dans le contexte de la simulation numérique des écoulements turbulents, les évaluations s'opèrent sur des champs de données tridimensionnels par produit tensoriel. Ainsi, si $\phi_{i,j,k} = \phi(x_i, y_j, z_k)$ est un champ discret scalaire tridimensionnel les dérivées spatiales sont évaluées par :

$$\begin{aligned} \partial_x \phi &= \left(\delta_x^{cf} \otimes \mathbf{I}_y \otimes \mathbf{I}_z \right) \phi \\ \partial_y \phi &= \left(\mathbf{I}_x \otimes \delta_y^{cf} \otimes \mathbf{I}_z \right) \phi \\ \partial_z \phi &= \left(\mathbf{I}_x \otimes \mathbf{I}_y \otimes \delta_z^{cf} \right) \phi \end{aligned}$$

Le surcoût algorithmique des schémas résulte de l'inversion des systèmes tridiagonaux ou pentadiagonaux M . Toutefois, la complexité algorithmique pour ce type de méthode est favorable car linéaire. Cette formulation de LELE (1992) contribua à la diffusion des schémas compacts en apportant une approche suffisamment souple pour discréteriser les principaux opérateurs : dérivation décalée, interpolation décalée, filtrage, dérivées premières, secondes et d'ordre 3. Rappelons que les schémas compacts restent un cas particulier des schémas Hermétiens proposés par COLLATZ (1960).

L'extension aux maillages non-uniformes s'obtient en utilisant une transformation analytique de maillage. Soit une transformation $x = x(X)$ où x est l'espace physique et X défini par le maillage

uniforme. En conséquence, le calcul des dérivées première et seconde est donné par :

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x} &= X_x \frac{\partial}{\partial X} \\ \frac{\partial^2}{\partial x^2} &= X_x^2 \frac{\partial^2}{\partial X^2} + X_{xx} \frac{\partial}{\partial X}\end{aligned}$$

Le calcul des métriques X_x et X_{xx} est alors analytique. Dans le cadre de ce mémoire, différentes fonctions de transformation ont été utilisées. A titre d'exemple, le raffinement aux bords du domaine de calcul est obtenu à l'aide de la fonction de transformation :

$$x(X) = \frac{1}{a} \tanh X \tanh^{-1} a$$

Une revue complète des différentes techniques de calcul des dérivées sur des maillages non-uniformes est proposée dans (VISBAL et al., 2002).

Les schémas compacts dissipent peu, mais ont tendance à développer des modes non-physiques à haute fréquence, pouvant conduire à des instabilités numériques. La non-uniformité du maillage, les conditions aux limites et la présence de gradients importants selon les écoulements considérés, sont souvent les facteurs déclenchant ces instabilités ou *wiggles*. Une procédure de filtrage des variables primaires, comme définie dans les travaux de VISBAL et al. (2002), devient alors nécessaire. En raison de sa simplicité de mise en oeuvre, le filtre utilisé dans mon travail est :

$$\alpha u_{i-1} + u_i + \alpha u_{i+1} = \sum_n^N a_n \frac{u_{i+n} + u_{i-n}}{2} \quad (2.41)$$

En accord avec les travaux de (VISBAL et al., 2002), dans le but de conserver la précision à l'ordre 4 (ou 6) des schémas compacts, un filtre implicite du 6ème ordre (ou 10ème ordre) est utilisé. Ce filtrage s'est révélé indispensable dans l'approche multidomaine lors de mes travaux de doctorat. Plus récemment, cette procédure de filtrage a permis de stabiliser les simulations dans le cas d'une cavité de ventilée (cf. chapitre 3). Il est à noter que le lien entre procédure de filtrage, simulation implicite des grandes échelles et modélisation du tenseur de sous-mailles reste un thème d'actualité (DAIRAY et al., 2017; LAMBALLAIS et al., 2021).

2.3.3 Schémas compacts pour problèmes elliptiques

L'évaluation des dérivées/interpolations par des schémas compacts ne présente pas de difficulté particulière, hormis la parallélisation. La conclusion semble être différente si l'on s'intéresse aux problèmes elliptiques. En effet, dans de nombreux cas, la discrétisation de cette famille de problème conduit à des systèmes linéaires denses. Ceci est en contradiction avec la notion d'approximation locale des schémas compacts. Ce point est discuté ci-après en présentant brièvement les causes de cette perte de localité. Ensuite, en m'appuyant sur la littérature, j'identifierai les deux grandes écoles permettant de discrétiser et résoudre des problèmes elliptiques à l'aide des schémas compacts.

Discrétisation par schémas compacts des problèmes elliptiques

Considérons un domaine périodique défini $[0, 1]$ discréte sur une grille de pas d'espace uniforme h . Soit le problème linéaire d'ordre 2 suivant :

$$-u'' + cu' + bu = f \quad (2.42)$$

avec $c \in \mathbb{R}$, $b > 0$, f une fonction suffisamment régulière définie sur un domaine périodique. Considérons également le schéma compact d'ordre 4 pour les opérateurs de dérivation première et seconde :

$$\frac{1}{4}u'_{i-1} + u'_i + \frac{1}{4}u'_{i+1} = \frac{3}{2} \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} \quad (2.43)$$

$$\frac{1}{10}u''_{i-1} + u''_i + \frac{1}{10}u''_{i+1} = \frac{6}{5} \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} \quad (2.44)$$

$$-u''_i + cu'_i + bu_i = f_i \quad (2.45)$$

Dans la démarche de COLLATZ (1960), il suffit de considérer le système de taille $3N$ constitué des inconnues (u''_i, u'_i, u_i) . En considérant une simple combinaison linéaire des équations (2.43)-(2.45) il est possible d'éliminer l'inconnue u''_i , réduisant ainsi le système à une dimension $2N$. Dans le cas où $c = 0$, le système se réduit un système tridiagonal. Dans le cas général, il est possible d'obtenir un système tridiagonal en suivant par exemple les approches de E. KRAUSE et al. (1976) et CIMENT et al. (1978) (Operator Compact Implicit). Dans cet exemple introductif, la formulation discrète d'un problème d'ordre 2 conduit alors à une molécule de calcul compacte.

Considérons à présent le formalisme de Lele avec une écriture explicite des opérateurs de dérivation, soit

$$-M_{xx}^{-1}\delta_{xx}U + cM_x^{-1}\delta_xU + bU = F \quad (2.46)$$

Il vient alors :

$$\delta_{xx}U + cM_{xx}M_x^{-1}\delta_xU + M_{xx}bU = M_{xx}F \quad (2.47)$$

Cette formulation compacte est assujettie à la condition $M_{xx} = M_x$. Dans ce cas la formulation de la dérivée compact première doit s'appuyer sur les points u_{i+2} et u_{i-2} pour conserver l'ordre 4 ($\alpha = 1/10$ dans l'équation (2.43) à la place de $1/4$ (LELE, 1992)). On perd ainsi l'essence même des schémas Hermitiens.

Cette perte de la localité est clairement visible dans la littérature en ce qui concerne la formulation discrète des opérateurs elliptiques associés à l'équation de correction de pression (ou problème de Poisson). En effet, en considérant le cadre unidimensionnel et périodique, ce problème de Poisson s'écrit alors :

$$-(u')' = f \quad (2.48)$$

qui conduit à la discrétisation suivante :

$$-\left[(M_x^{fc})^{-1}b_x^{fc}\right]\left[(M_x^{cf})^{-1}b_x^{cf}\right]U = -\delta^2U = S \quad (2.49)$$

où, les matrices $(M_x^{fc})^{-1}b_x^{fc}$ et $(M_x^{cf})^{-1}b_x^{cf}$ sont des matrices denses résultant de la discrétisation compacte des dérivées décalées. Il y a clairement perte du caractère compact de l'approximation à cause de la non-commutation des matrices M^{cf} et δ_x^{fc} . Or, cet exemple est le cœur d'un solveur fluide incompressible nécessitant des stratégies spécifiques pour contourner cette difficulté. Les travaux de SCHIESTEL et al. (1995) ou WILSON et al. (2001) illustrent ce type de stratégie.

Discrétisation des opérateurs elliptiques selon Lele

Le paragraphe précédent souligne la difficulté à conserver le caractère local des schémas compacts pour les problèmes elliptiques et plus particulièrement pour le problème de Poisson de l'étape de projection. Ces deux aspects restent encore incontournables pour la simulation des écoulements, malgré l'essor des méthodes de type compressibilité artificielle ou *lattice Boltzmann*. D'un point de vue pratique, cela limite fortement le développement d'un solveur linéaire optimal puisque l'on doit considérer des systèmes linéaires denses et mal conditionnés pénalisant les performances des méthodes itératives classiques. Une analyse de la littérature sous cet angle, restreinte à la simulation des écoulements, illustrant cette difficulté est présentée ci-après.

Par exemple, SCHIESTEL et al. (1995) proposèrent un solveur itératif pour la correction de pression. Plus précisément, il s'agissait d'un solveur de type *defect correction* pour lequel une équation sur le résidu à l'ordre 2 est introduite. S'agissant d'un écoulement à deux directions homogènes discrétisées par Galerkin-Fourier, le solveur de Poisson d'ordre 2 est résolu à l'aide d'un simple algorithme TDMA. Cette approche est retenue par Knikker pour son solveur incompressible KNIKKER (2009)

et bas nombre de Mach (KNIKKER, 2011). Pour les équations de quantité de mouvement, il emploie comme préconditionneur un solveur ADI et pour l'équation de Poisson un solveur multigrille. Il est important de souligner les similitudes importantes avec l'approche par préconditionnement des opérateurs elliptiques pour les méthodes spectrales (CANUTO et al., 2012; HALDENWANG et al., 1984). Dans cette approche, le système linéaire est préconditionné par un problème spectralement équivalent dont la résolution est plus simple. On citera par exemple l'analyse de HALDENWANG et al. (1984) pour un préconditionnement par différences finies ou encore plus récemment la recherche de préconditionnement optimal proposé par LABROSSE et al. (2011). BOERSMA (2011) utilise pour comme solution du problème de Poisson un solveur itératif de type Krylov et non-préconditionné mais sans discussion sur la convergence. Ainsi, à l'instar de la méthode de préconditionnement des opérateurs elliptiques des discrétisations spectrales, les schémas compacts n'interviennent que par le biais de l'évaluation des résidus.

S'agissant des méthodes directes, LAIZET et al. (2009) proposèrent un solveur optimal d'un point de vue algorithmique en utilisant un solveur rapide FFT. A l'heure actuelle, ce solveur est sans doute l'un des plus performant. Toutefois, ce solveur direct rapide constraint à un raffinement de maillage dans une seule direction et restreint fortement le choix du type de conditions aux limites.

A l'instar des méthodes spectrales (CANUTO et al., 2012), VEDY et al. (2003) proposèrent une méthode de diagonalisation successive (LYNCH et al., 1964) pour les schémas compacts. On notera que le code SAILOR développé par TYLISZCZAK (2016) utilise aussi la méthode de diagonalisation. L'extension multidomaine par matrice d'influence est donnée dans (ABIDE et al., 2005) et avec une extension aux géométries cylindriques dans OGUIC et al. (2015). La méthode de diagonalisation est un solveur linéaire direct qui repose sur la séparabilité de la discrétisation (LYNCH et al., 1964). Cette technique, surtout employée dans la communauté spectrale (RASPO et al., 1996; SERRE et al., 2001), illustre la porosité avec la communauté des schémas compacts. Toutefois, elle est limitée aux problèmes séparables, à coefficient constant, du fait de l'étape de diagonalisation qui est trop coûteuse même pour les problèmes de petite dimension. De plus, sa complexité algorithmique étant quadratique, cette technique devient rapidement prohibitive en temps de calcul.

Ces éléments bibliographiques montrent les difficultés dans le traitement des discrétisations par schémas compacts des problèmes elliptiques. La perte du caractère local des schémas compacts s'explique par ce point. En effet, de nombreux travaux inspirés de MACKINNON et al. (1991) proposent par ailleurs des formulations multidimensionnelles des opérateurs elliptiques conduisant à des systèmes linéaires creux, et permettant la mise en oeuvre de méthodes multigrilles performantes, par exemple.

Discrétisation des opérateurs elliptiques selon l'idée de MacKinnon

En s'appuyant sur les travaux de MACKINNON et al. (1991), SPOTZ et al. (1995) propose de construire un schéma de type différences finies compactes en discrétisant l'erreur de troncature même. Cette technique est illustrée ci-après pour le problème unidimensionnel $u'' = s$:

$$\begin{aligned}
 \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} &= u_i''(x_i) + \frac{h^2}{12}u^{(4)} + o(h^4) \\
 &= u_i''(x_i) + \frac{h^2}{12} \left((u_{i+1}'' - 2u_i'' + u_{i-1}'')/h^2 + o(h^2) \right) + o(h^4) \\
 &= \frac{1}{12}u_{i+1}'' + \frac{5}{6}u_i'' + \frac{1}{12}u_{i-1}'' + o(h^4) \\
 &= \frac{1}{12}s_{i+1} + \frac{5}{6}s_i + \frac{1}{12}s_{i-1} + o(h^4)
 \end{aligned}$$

Le point clef reste la réécriture de l'erreur de troncature à partir des dérivées de l'équation différentielle. Cette approche offre une souplesse d'utilisation relativement simplifiée lorsque les coefficients sont variables et permet de conserver le caractère local des schémas compacts.

De nombreux travaux trouvent leurs origines dans ce formalisme. On notera par exemple le travail de J. ZHANG et al. (2000) qui étend la procédure de SPOTZ et al. (1995) aux équations de convection/diffusion tri-dimensionnelles et introduit un solveur multigrille pour l'inversion du système linéaire qui est creux dans ce cas. Les études de convergence de FOURNIÉ et al. (2006), KARAA et al. (2002) montrent l'intérêt des méthodes multigrilles car elles permettent de combiner à la fois précision d'ordre élevé et optimalité du solveur, i.e. la complexité algorithmique linéaire. Dans le cas de coordonnées cylindriques, LAI et al. (2007) montrent l'efficacité d'un solveur BICGstab préconditionné par un solveur rapide selon une discrétisation par des différences finies centrées d'ordre 2. Cette technique rappelle fortement le préconditionnement des opérateurs elliptiques utilisé dans le cadre des méthodes spectrales (CANUTO et al., 2012). Cette approche s'applique naturellement en mécanique des fluides par le biais de la formulation fonction de courant/vorticité des équations de Navier-Stokes incompressibles. Les récents travaux de KUMAR et al. (2020) illustrent encore cette tendance, ou les travaux de CROISILLE (2013) qui propose un schémas pour la résolution d'équations de transport sur une sphère cubique. Bien que la littérature prouvent les performances de ces solveurs itératifs pour ces schémas compacts, il me semble que cette approche n'ai jamais été employée pour l'étude d'écoulements turbulents tridimensionnels incompressibles. J'attribue cela au formalisme souvent complexe (recours au calcul symbolique) des formulations obtenues qui est peu compatible avec les grilles décalées par exemple. On notera toutefois que cette approche préserve la nature locale des schémas compacts quant à la discrétisation des problèmes elliptiques.

2.4 Vers une exploitation de la localité des schémas compacts

Dans cette section, j'introduis et argumente la notion d'approximation quasi-locale pour les schémas compacts. L'analyse précédemment menée souligne le caractère local des schémas compacts est de fait peu exploité. Or, une meilleure compréhension de ces aspects pourrait conduire à un parallélisme plus efficace et à une plus grande généralité des problèmes pouvant être traités. J'illustre donc ce point de vue au travers de la méthode de décomposition de domaine proposée en thèse et le développement d'un schéma itératif.

2.4.1 Schémas compacts ou approximations quasi-locales

La dénomination *schéma compact* est associée au fait que pour une taille de molécule donnée l'erreur de troncature est inférieure à celle des différences finies classiques. Ce point semble discutable lorsqu'il s'agit de considérer des problèmes elliptiques comme indiqué au paragraphe 2.3.3. Afin d'illustrer ces propos, considérons ici la dérivation seconde discrétisée à l'ordre 2 centré, à l'ordre 4 en compact, ainsi qu'avec une méthode pseudo-spectrale. Le domaine est donc périodique et nous considérons 6 noeuds pour la discrétisation. Exprimé sous la forme explicite pour les schémas compacts $\delta = M^{-1}B$, ces opérateurs discrets se réduisent aux matrices circulantes suivantes :

$$\delta_{fd}^2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & -2 & 1 & 0 \end{bmatrix} \frac{36}{4} \quad (2.50)$$

$$\delta_{hocs}^2 = \frac{1}{33} \begin{bmatrix} -5 & 49 & -89 & 49 & -5 & 1 \end{bmatrix} \frac{36}{4} \quad (2.51)$$

$$\delta_{sp}^2 = \begin{bmatrix} -5/3 & 1/2 & 5/6 & -1 & 5/6 & 1/2 \end{bmatrix} \quad (2.52)$$

Sur cet exemple la nature globale des différences finies compactes est claire. Toutefois, en comparaison à la discrétisation pseudo-spectrale, une décroissance des poids hors diagonale est observée. La figure 2.3 présente la molécule de calcul dans le cas périodique pour les schémas compacts d'ordre 4 et 6, ainsi que les différences finies centrées d'ordre 2. Cette représentation illustre la décroissance exponentielle des poids dans la relation discrète de dérivation des schémas compacts. Ce point précis

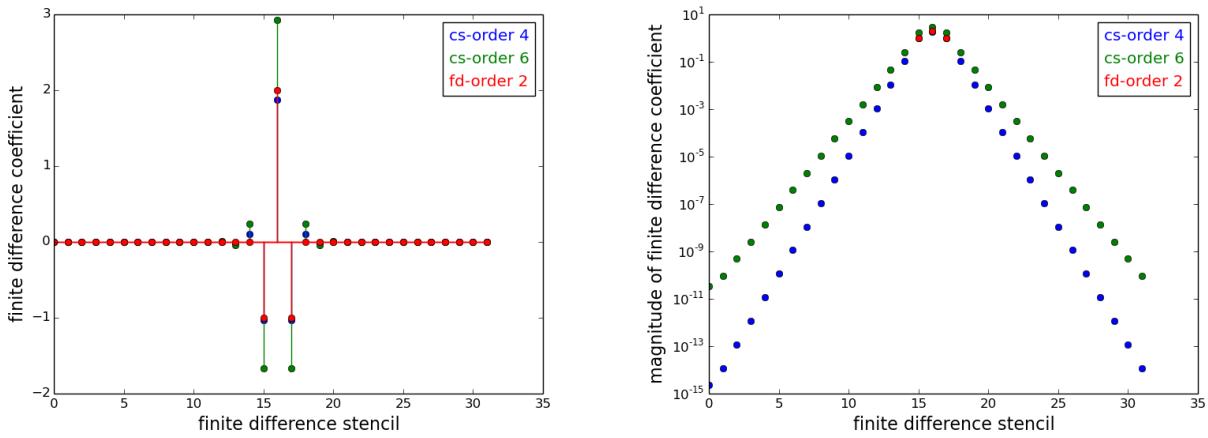


FIGURE 2.3 – Comparaison des molécules de calcul de différents opérateurs de dérivée seconde.

réulte de la dominance de la diagonale du système linéaire associé aux schémas compacts (SUN, 1995). Cette particularité devrait orienter une stratégie de parallélisation pour tirer partie de communications locales. Elle est à opposer à la stratégie de parallélisation par décomposition en pinceaux, qui implique un volume de données échangé (N. LI et al., 2010). Cette stratégie locale de parallélisation est celle que j’adopte dans mes travaux (ABIDE, BINOUS et al., 2017 ; ABIDE et al., 2018) pour l’évaluation des termes explicites par des schémas compacts : elle sera détaillée au chapitre 2.

2.4.2 Méthodes multidomaines

Dans le cadre de ma thèse de Doctorat, nous avions proposé avec S. Viazzo une méthode de décomposition de domaine pour simuler des écoulements incompressibles en géométries complexes composées d’un pavage de domaines rectangulaires (ABIDE et al., 2005). Ce choix était motivé par le souhait d’étendre la précision élevée des schémas compacts aux géométries complexes pour les opérateurs elliptiques résultant de la méthode de projection (cf. § 2.1). Une technique de matrice d’influence avait donc été retenue comme dans les travaux de (RASPO et al., 1996), qui a développé cette approche avec succès dans le cadre des méthodes spectrales.

On présente ici les grandes lignes de la méthode pour un domaine 1d périodique dans le but de montrer comment cette approche *redonne* de la localité aux opérateurs elliptiques discrétisés avec des schémas compacts ou des méthodes spectrales. Soit $\Omega = [a, b]$ un domaine périodique décomposé en 3 sous-domaines sans recouvrement $\Omega = \Omega^{(1)} \cup \Omega^{(2)} \cup \Omega^{(3)}$. Sur chaque sous-domaine $\Omega^{(p)}$ sont alors définis les sous-problèmes elliptiques suivants :

$$-u'' = s \quad \text{sur } \Omega^{(p)} \quad (2.53)$$

$$[u] = [u'] = 0 \quad \text{sur } \Gamma_{pq} = \Omega^{(p)} \cap \Omega^{(q)}, q \neq p \quad (2.54)$$

où $\Gamma_{pq} = \Omega^{(p)} \cap \Omega^{(q)}, q \neq p$ font références aux interfaces, et l’opérateur $[\phi](x) = \phi(x^+) - \phi(x^-)$ est le saut de la fonction ϕ en x un point de l’interface. Pour des solutions suffisamment régulières, cette formulation est consistante avec le problème mono-domaine suivant :

$$-u'' = s \quad \text{sur } \Omega \quad (2.55)$$

Le fil conducteur de la méthode multidomaine considérée consiste en l’imposition des conditions de régularité discrète (ou de transmission) de la solution sur l’interface. On développe alors la solution

sous la forme de la combinaison linéaire suivante :

$$\begin{aligned} u^1 &= \lambda_-^1 \tilde{u}_-^1 + \lambda_+^1 \tilde{u}_+^1 + u_h^1 \\ u^2 &= \lambda_-^2 \tilde{u}_-^2 + \lambda_+^2 \tilde{u}_+^2 + u_h^2 \\ u^3 &= \lambda_-^3 \tilde{u}_-^3 + \lambda_+^3 \tilde{u}_+^3 + u_h^3 \end{aligned}$$

avec $\{\lambda_{+/-}^i\}$ la restriction de la solution à l'interface, et $\tilde{u}_{+/-}^i$ sont solutions dites harmoniques satisfaisant :

$$\left\{ \begin{array}{lcl} -\delta_x^2 \tilde{u}_-^i & = & 0 \quad \text{sur } \Omega^i \\ \tilde{u}_-^i & = & 1 \quad \text{sur } \Gamma_-^i \\ \tilde{u}_+^i & = & 0 \quad \text{sur } \Gamma_+^i \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{lcl} -\delta_x^2 \tilde{u}_+^i & = & 0 \quad \text{sur } \Omega^i \\ \tilde{u}_-^i & = & 0 \quad \text{sur } \Gamma_-^i \\ \tilde{u}_+^i & = & 1 \quad \text{sur } \Gamma_+^i \end{array} \right. \quad (2.56)$$

Par ailleurs, la solution homogène u_h satisfait le problème :

$$\left\{ \begin{array}{lcl} -\delta_x^2 u_h^p & = & s \quad \text{sur } \Omega^p \\ u_h^p & = & 0 \quad \text{sur } \Gamma_-^p \\ u_h^p & = & 0 \quad \text{sur } \Gamma_+^p \end{array} \right. \quad (2.57)$$

Les valeurs à l'interface sont calculées en appliquant la condition de saut sur la dérivée à l'interface. Cela conduit à la construction du système linéaire suivant :

$$\begin{aligned} [\text{MIC}] \Lambda &= U_h \\ \Lambda &= [\lambda_-^{(1)}, \lambda_+^{(1)}, \lambda_-^{(2)}, \lambda_+^{(2)}, \lambda_-^{(3)}]^t \\ U_h &= [\delta u_h^1|_- - \delta u_h^3|_+, \delta u_h^1|_+ - \delta u_h^2|_-, \delta u_h^2|_- - \delta u_h^1|_+, \delta u_h^2|_+ - \delta u_h^3|_-, \delta u_h^3|_- - \delta u_h^2|_+]^t \end{aligned} \quad (2.58)$$

où $[\text{MIC}]$ est une matrice dense appelée matrice d'influence de continuité. On adjoint enfin à la matrice d'influence, le problème discret suivant pour le calcul de la solution par sous-domaine :

$$\begin{bmatrix} M^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & M^{(2)} & 0 \\ 0 & 0 & M^{(3)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u^1 \\ u^2 \\ u^3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b^1 \\ b^2 \\ b^3 \end{bmatrix} \quad (2.59)$$

C'est la discrétisation sur chaque sous-domaine du problème elliptique (2.55) en considérant les conditions aux limites de type Dirichlet à l'interface. Si les valeurs $\lambda_{+/-}^i$ sont nulles ou solutions du système linéaire (2.58), alors on calcule la solution homogène u_h ou la solution finale du problème (2.58). Ces deux étapes sont parfaitement réalisables en parallèle. L'algorithme qui en découle est ainsi composé de trois étapes : calcul de la solution homogène u_h , calcul des valeurs aux interfaces Λ et calcul de la solution u .

On notera que le problème global sur Ω se réduit à trois sous-problèmes quasiment indépendants. Une analyse sous l'angle de la localité des données montre que la décomposition de domaine permet d'introduire de la localité par le biais de la matrice diagonale par bloc (2.59). C'est une spécificité qui est exploitée pour le calcul parallèle ainsi que pour complexifier la géométrie (OGUIC et al., 2015 ; RASPO et al., 1996). Toutefois, la matrice d'influence devient rapidement de dimension importante puisqu'elle est de dimension égale au nombre de degrés de liberté à l'interface. De plus, cette matrice est dense, rendant la résolution délicate sur architecture parallèle pour des problèmes de grandes dimensions et sur des systèmes massivement parallèles. On notera que dans notre approche, un décentrement de la discrétisation est également introduit aux interfaces. Cependant ce décentrement peut engendrer des instabilités qu'il convient alors de maîtriser par un raffinement adapté ou un filtrage. Il s'agit là d'un exemple de difficultés rencontrées en cherchant à retrouver de la localité avec les schémas compacts lors de la résolution de problèmes elliptiques.

Pour l'étude d'écoulements en transition vers la turbulence ou modérément turbulents cette approche permet de conserver l'ordre 4 ou 6 en géométrie complexe avec une parallélisation modérée. Un

exemple d'application est le couplage thermique pariétal qui conserve les précisions d'ordre 4 ou 6 des schémas compacts (ABIDE et al., 2009). On notera l'activité de S. Viazzo sur les écoulements en rotation employant cette méthodologie (OGUIC et al., 2015 ; VIAZZO et al., 2011). Ou encore, ALIZARD et al. (2012) qui retiennent cette méthode pour une étude de stabilité d'écoulement d'une cavité carrée affleurant un canal. Plus récemment, ŽNIDARČIČ et al. (2019) ont tenté d'utiliser cette technique pour traiter des écoulements avec cavitation.

Dans le cadre de mes travaux, je n'ai pas retenu cette approche car la matrice d'influence rend complexe sa mise en oeuvre dans le cadre du calcul massivement parallèle. De plus lors de l'étude des écoulements turbulents, le décentrement rend la méthode peu compatible pour l'étude des écoulements pleinement turbulents d'une manière optimale.

2.4.3 Un schéma de type boite pour schémas compacts

Les schémas de type *Mehrestellen* ou adoptant l'approche de MACKINNON et al. (1991) en dimension 2 et 3 présentent l'avantage de préserver un caractère local tout en conservant une précision élevée (cf. §1.3). Toutefois, ils ne s'appliquent pas à la formulation de problèmes elliptiques résultant de la combinaison des opérateurs de divergence et de gradient. Or, ces problèmes elliptiques sont essentiels dans l'algorithme de projection (cf. §1.1). Je propose une alternative dans l'article (ABIDE et al., 2012) dont je présente les grandes lignes et principaux résultats ci-après.

Dans l'idée d'exploiter la localité des schémas compacts pour le problème de Poisson, je propose une généralisation du schéma dit combiné de CAREY et al. (1997). L'idée est d'introduire comme inconnues supplémentaires les dérivées normales $\sigma = [\sigma_x, \sigma_y]^t$ pour un système de coordonnées Cartésiennes bidimensionnelles. Cette démarche peut être interprétée comme une extension multidimensionnelle de l'approche de (COLLATZ, 1960). Elle conduit à considérer le problème mixte suivant :

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \sigma &= f \\ \sigma &= \nu u + \mathbf{c} u \end{aligned} \quad (2.60)$$

où le coefficient de diffusion ν et le champ de vitesse de convection \mathbf{c} peuvent dépendre des variables d'espace. Les variables discrètes sont $u_{ij} = u(x_i, y_j)$ et les composantes du flux σ_{ij} . Dans (ABIDE et al., 2012) je propose une famille de schémas compacts incluant le schéma original de SPOTZ et al. (1994). La discrétisation de l'équation de conservation est donnée par :

$$D_x U + D_y U = IS \quad (2.61)$$

où D_x , D_y et I représentent la molécule de calcul :

$$D_x = \frac{1}{h} \begin{bmatrix} \frac{1}{4} - a & 0 & a - \frac{1}{4} \\ 1 - 4a & 0 & 4a - 1 \\ \frac{1}{4} - a & 0 & a - \frac{1}{4} \end{bmatrix}, \quad D_y = \frac{1}{h} \begin{bmatrix} \frac{1}{4} - a & 4a - 1 & a - \frac{1}{4} \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{4} - a & 1 - 4a & a - \frac{1}{4} \end{bmatrix} \quad (2.62)$$

$$I = \begin{bmatrix} a & \frac{1}{2} - 4a & a \\ \frac{1}{2} - 4a & 1 & \frac{1}{2} - 4a \\ a & \frac{1}{2} - 4a & a \end{bmatrix} \quad (2.63)$$

Ce schéma conduit à une erreur troncature de l'équation de conservation :

$$\left(\frac{1}{60} - \frac{1}{15}a \right) (\partial_x^5 f + \partial_y^5 g) h^4 + \left(-\frac{1}{12} + \frac{4}{3}a \right) (\partial_x^3 \partial_y^2 f + \partial_x^2 \partial_y^3 g) h^4 \quad (2.64)$$

Pour la relation de flux $f = u\phi - \Gamma \partial_x \phi$, le schéma est alors construit sur les relations classiques des schémas compacts :

$$\begin{aligned} \frac{1}{4h} (\text{Pe}_{i-1,j} + 3) \phi_{i-1,j} + \frac{1}{h} \text{Pe}_{i,j} \phi_{i,j} + \frac{1}{4h} (\text{Pe}_{i+1,j} + 3) \phi_{i+1,j} = \\ \left(\frac{1}{4\Gamma_{i-1,j}} f_{i-1,j} + \frac{1}{\Gamma_{i,j}} f_{i,j} + \frac{1}{4\Gamma_{i+1,j}} f_{i+1,j} \right) \end{aligned} \quad (2.65)$$

où $\text{Pe}_{i,j} = u_{i,j}h/\Gamma_{ij}$ est le nombre de Péclet de cellule. Ce schéma de discréétisation mène à la construction d'une matrice creuse pour un problème convection/diffusion. Il s'agit d'une matrice bloc définie par :

$$\begin{pmatrix} F_x & 0 & G_x \\ 0 & F_y & G_y \\ D_x & D_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \phi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ S \end{pmatrix} \quad (2.66)$$

On notera que selon cette formulation le caractère local des schémas compacts est conservé. Toutefois, la conséquence est une augmentation sensible du nombre de degrés de liberté à cause de l'introduction des flux σ_x et σ_y . L'applicabilité de la méthode a été démontrée pour des problèmes de calcul d'harmoniques sphériques ou du modèle simplifié de Stommel (ABIDE et al., 2012). L'avantage de la méthodologie proposée est qu'il devient alors possible de traiter les problèmes à coefficients variables et d'envisager une extension aux géométries complexes sans avoir recours à la technique de la matrice d'influence et au décentrement des schémas comme avec la méthode multidomaine (sec. 2.4.2). L'inconvénient est la complexité technique de la mise en oeuvre sur maillages décalés et non-uniformes, ainsi que les temps de calcul prohibitifs inhérents au solveur direct dans un contexte de simulation numérique de la turbulence. La difficulté est accrue lorsqu'il convient de considérer l'étape de parallélisation.

Néanmoins, la structure creuse du système linéaire conduit naturellement à rechercher un solveur itératif comme alternative au solveur direct pour résoudre le système linéaire (2.66). Il présente un mauvais conditionnement à cause de la discréétisation d'ordre élevé et nécessite la mise en oeuvre de préconditionneur spécifique. Je considère dans (ABIDE et al., 2013) le problème de Poisson tel que défini pour de correction de pression. Cela implique, dans le cas d'un maillage décalé, d'inclure la forme *div-grad* pour cet opérateur elliptique à coefficient constant. La méthodologie précédente s'applique à l'identique où les matrices blocs sont définis par :

$$\begin{aligned} F_x &= M_x^{cf} \otimes I_y, & G_x &= \delta_x^{cf} \otimes I_y, & D_x &= \delta_x^{fc} \otimes M_y^{fc} \\ F_y &= I_x \otimes M_y^{cf}, & G_y &= I_x \otimes \delta_y^{cf}, & D_y &= M_x^{fc} \otimes \delta_y^{fc} \end{aligned} \quad (2.67)$$

Les matrices M^{cf} , M^{fc} , δ^{cf} et δ^{fc} correspondent à la discréétisation des schémas compacts sur maillage décalé (cf. section 2.3). L'élimination algébrique des variables de type flux σ_x et σ_y conduit alors au système suivant :

$$-\mathbf{D}\mathbf{F}^{-1}\mathbf{G}\phi = \tilde{\mathbf{S}} \quad (2.68)$$

La matrice diagonale par bloc F est une matrice des masses associée à la définition même des schémas compacts. Une normalisation adéquate de F conduit alors au préconditionnement $M = DG$: il s'agit alors de la discréétisation centrée d'ordre 2 si les schémas d'ordre 4 sont considérés.

Cette démarche conduit à la notion de préconditionnement des opérateurs elliptiques telle qu'elle est introduite dans (CANUTO et al., 2012) ou étudiée par HALDENWANG et al. (1984) pour les méthodes spectrales. Pour ces discréétisations une analyse systématique de la convergence a été entreprise pour la méthode de Richardson. (CANUTO et al., 2012; WILSON et al., 2001). Or il semble que bien cette technique ait été utilisée par les auteurs KNIKKER (2009), SCHIESTEL et al. (1995) pour des raisons algorithmiques sans entreprendre l'analyse de convergence. Un préconditionnement par discréétisation d'ordre inférieur est esquissé dans (ABIDE et al., 2013) et analysé dans les articles (ABIDE & ZEGHMATI, 2017; ABIDE, 2020).

2.5 Conclusion et démarche scientifique

Ce chapitre introduit les modèles d'écoulements incompressibles et quasi incompressibles ainsi que leur traitement numérique. Une discréétisation temporelle associée à un algorithme de projection permet de transformer le problème initial en une série d'évaluation d'opérateurs discrets et conduisant

à la résolution de problèmes paraboliques et elliptiques. La problématique du temps de restitution des simulations numériques dans le cadre des écoulements turbulents ou en transition est alors intimement liée à la discrétisation spatiale et aux techniques de résolution associées à l'évaluation des termes explicites et à la résolution des opérateurs elliptiques.

Ainsi, il y est argumenté que les approximations locales sont de bons candidats à la parallélisation en raison du volume de communication potentiellement minimal, et permettent une plus grande diversité dans le choix des modèles d'écoulements notamment les problèmes à coefficients variables. L'emploi des discrétisations d'ordre élevé est l'alternative historique pour minimiser du coût du calcul. Or, la compatibilité de ces discrétisations avec le calcul massivement parallèle reste un problème ouvert, par exemple. Sur la base de la revue bibliographique de ce chapitre et de l'analyse critique de mes travaux préliminaires, j'explique pourquoi le caractère local des schémas compacts me semble en général sous-exploité, et plus spécifiquement pour les opérateurs elliptiques. Ce dernier point synthétise mon axe de recherche principal : comment exploiter le caractère local des schémas compacts pour la parallélisation et résoudre efficacement des problèmes complexes ?

Ma démarche scientifique s'est articulée selon les trois points suivants :

- exploitation de la dominance de la diagonale des schémas compacts,
- parallélisation de l'algorithme de diagonalisation,
- maîtrise de la convergence des solveurs itératifs pour traiter des modèles complexes et accroître les performances.

En d'autres termes, mes travaux de recherche contribuent à discuter de la capacité des schémas compacts pour réduire les temps de simulations (HPC et ordre élevé) de modélisations complexes au sens où elles nécessitent la résolution de problèmes elliptiques non-séparables.

CHAPITRE 3

MÉTHODES NUMÉRIQUES

Ce chapitre expose mes contributions méthodologiques sur les schémas compacts. Elles concernent principalement la simulation des écoulements incompressibles en incluant le calcul haute performance. Ainsi, je présente une parallélisation du solveur direct diagonalisation successive. Puis, j'illustre comment exploiter la nature quasi-locale des schémas compacts pour évaluer les opérateurs discrets (interpolations/dérivations) avec un volume de communications minimum : c'est l'approche *reduced Parallel Diagonal Dominant*. Le dernier aspect de ce chapitre concerne le préconditionnement des opérateurs elliptiques par des approximations locales. Cette approche me permet de traiter des problèmes elliptiques non-séparables afin de simuler des écoulements avec l'approximation dite de bas nombre de Mach, par exemple.

3.1 Évaluation parallèle des schémas compacts

Les schémas compacts sont des différences finies implicites nécessitant l'inversion de systèmes linéaires tridiagonaux pour les précisions les plus faibles. Ces systèmes linéaires possèdent la particularité d'être à diagonale dominante permettant l'émergence d'un parallélisme s'appuyant sur un schéma de communications locales (SUN, 1995). L'approche rPDD repose sur une résolution approchée dont l'erreur décroît exponentiellement avec l'amplitude de la diagonale dominante. Il s'agit donc d'estimer l'influence de cette résolution approchée sur les propriétés de précision et de conservation des solveurs Navier-Stokes incompressibles. C'est l'objet des paragraphes suivants.

3.1.1 La méthode reduced Parallel Diagonal Dominant

Le calcul d'une dérivée ou interpolation avec des schémas compacts repose principalement sur l'inversion de multiples systèmes tridiagonaux ou pentadiagonaux dans les trois directions de l'espace. L'inversion séquentielle ne pose aucune difficulté et possède une complexité algorithmique linéaire. A l'image du calcul distribué des transformées de Fourier, la parallélisation par décomposition en pinceaux (ou pencil decomposition) est une approche efficace pour l'inversion de systèmes tridiagonaux (LAIZET et al., 2009). Néanmoins, la distribution dynamique des données induit un coût informatique important en raison du volume conséquent de données échangées. Une alternative consiste à utiliser un solveur parallèle approché *reduced Parallel Diagonal Dominant* (rPDD) pour évaluer les schémas compacts (SUN, 1995). Dans cette approche, les communications sont locales et, par conséquent, respectent la nature locale des schémas compacts. Toutefois, ce solveur étant approché il est nécessaire de valider qu'il garantisse les propriétés de conservation usuelles. C'est en partie l'objet des deux articles (ABIDE, BINOUS et al., 2017; ABIDE et al., 2018) pour les écoulements incompressibles en

coordonnées cartésiennes et cylindriques.

Le principe de la méthode est brièvement décrit ci-après. Les schémas du quatrième ou sixième ordre (LELE, 1992) nécessitent la résolution d'un système linéaire sous la forme $Mx = d$ avec $x = (x_1, \dots, x_n)^T$, $d = (d_1, \dots, d_n)^T$. La méthode rPDD consiste à distribuer ce système linéaire sur P processeurs. Il en résulte un partitionnement des vecteurs notés $\mathbf{x} = (\mathbf{x}^{(1)}, \dots, \mathbf{x}^{(p)})^T$ avec $\mathbf{x}^{(k)} = (x_1^{(k)}, \dots, x_m^{(k)})^T$ et $1 \leq k \leq p$. De même, la matrice originale M est partitionnée en $M = \tilde{M} + \Delta M$ où \tilde{M} est une matrice diagonale par bloc dont les blocs sont tridiagonaux. Notons, $M^{(k)}$ le k -ème bloc tridiagonal et $\Delta M = M - \tilde{M}$ les termes résiduels issus de cette décomposition. La partition de la matrice M et son inverse MM^{-1} sont présentés figure 3.1. Le produit du système

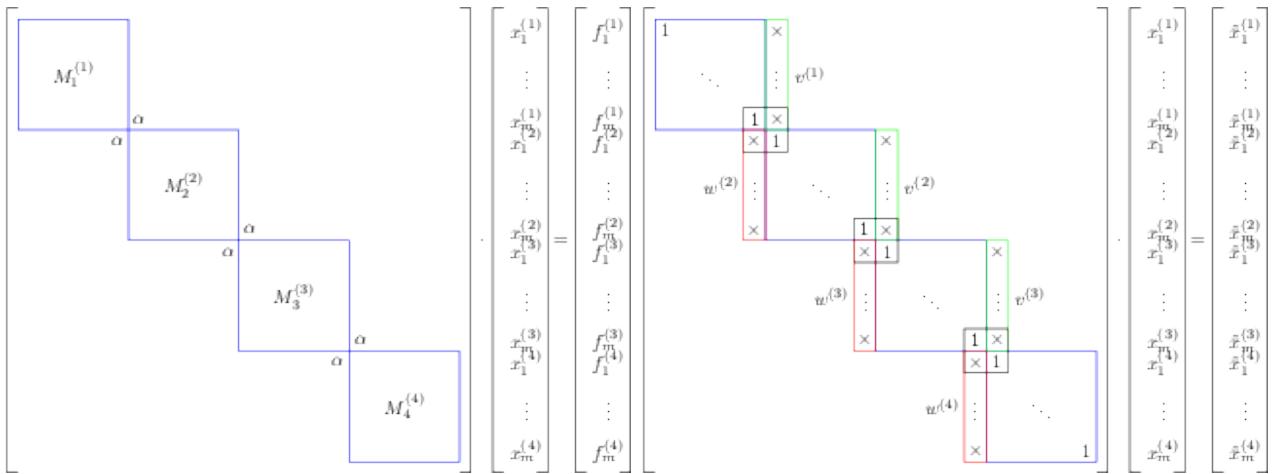


FIGURE 3.1 – Partition d'une matrice tridiagonale $Mx = (\tilde{M} + \Delta M)x = b$ (a), et son inverse (b) $\tilde{M}^{-1}Mx = (I + \tilde{M}^{-1}\Delta M)x = \tilde{M}^{-1}b$ (ABIDE, BINOUX et al., 2017).

linéaire tridiagonal original par la matrice inverse par bloc \tilde{M}^{-1} conduit à une matrice identité par bloc encadrée par deux vecteurs colonnes $v^{(k)}$ et $w^{(K)}$, désignés par le terme *spike* (SUN, 1995). La figure 3.1b montre la structure de la matrice $\tilde{M}^{-1}M$. Le premier et le dernier noeud de chaque partition, $x_1^{(k)}$ et $x_m^{(k)}$ déterminent un système linéaire pentadiagonal nommé *système réduit* (SUN, 1995). Indépendamment de l'hypothèse de la diagonale dominante, l'algorithme parallèle pour résoudre $Mx = b$ comporte les étapes suivantes :

1. calcul de la solution intermédiaire $\tilde{x} = \tilde{M}^{-1}b$: cette étape est réalisée en parallèle sur chaque processeur,
2. résolution du système réduit : le premier et le dernier noeud de chaque partition, $x_1^{(k)}$ et $x_m^{(k)}$ sont calculés,
3. calcul de la solution : les *spike* sont exploités $x^{(k)} = \tilde{x}^{(k)} - x_1^{(k)}v^{(k)} - x_m^{(k)}w^{(k)}$.

Une analyse mathématique est proposée par POLIZZI et al. (2007). Dans le contexte de la simulation numérique des écoulements incompressibles, l'évaluation d'un opérateur compact dans une direction nécessite la résolution d'un système tridiagonal sur chaque processeur, suivie d'une communication collective des noeuds d'interface dans la direction considérée. Le volume des données échangées est donc de l'ordre de la surface de la décomposition et non du volume, comme dans l'approche par décomposition en pinceaux.

L'exploitation de la diagonale dominante permet de réduire notablement ce volume (SUN, 1995) : on parle alors de reduced Partial Diagonal Dominant. En effet, les éléments des vecteurs $v^{(k)}$ et $w^{(k)}$ décroissent exponentiellement avec la distance à la diagonale. Par troncature des éléments les plus éloignés, le système réduit dégénère en systèmes linéaires indépendants de dimension 2 associés aux noeuds adjacents aux interfaces $x_M^{(k-1)}$ et $x_1^{(k)}$. SUN (1995) donne une estimation de l'erreur associée

à cette troncature. Elle vérifie la relation :

$$\frac{\|x - x^*\|}{\|x\|} \leq \frac{b^m}{a(\alpha - b)(a - 1)} \quad (3.1)$$

où x^* est la solution exacte, et pour laquelle les coefficients a et b :

$$a = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\alpha} + \sqrt{\frac{1}{\alpha^2} - 4} \right), \quad b = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\alpha} - \sqrt{\frac{1}{\alpha^2} - 4} \right) \quad (3.2)$$

L'erreur introduite se comporte donc comme une puissance du nombre de noeuds par sous-domaine m . Une valeur de m peut être estimée à priori afin d'atteindre une précision définie par l'utilisateur. Par exemple, la précision $\|x - x^*\| / \|x\| = 10^{-15}$ est atteinte pour une valeur de m autour de 15 lorsqu'elle est appliquée à la dérivée décalée ($\alpha = 1/22$), et autour de 20 pour l'interpolation décalée ($\alpha = 1/6$), toutes deux d'ordre 4. La figure 3.2 montre l'erreur par rapport à la taille m du sous-domaine déterminée à partir de l'équation (3.2). Ces premières estimations d'erreur montrent qu'elles sont de

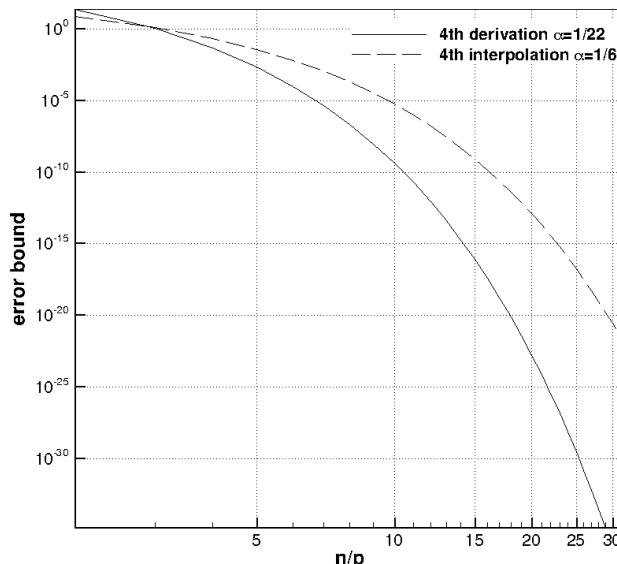


FIGURE 3.2 – Estimation d'erreur de l'algorithme rPDD, en fonction du nombre de nœuds dans chaque sous-domaine $m = n/p$ (ABIDE, BINOUS et al., 2017).

l'ordre de la précision machine pour des sous-domaines de l'ordre de 16 noeuds. Néanmoins, il a été nécessaire d'estimer l'impact de cette erreur sur la qualité de l'approximation dans le contexte de la simulation des écoulements incompressibles. C'est l'objet de la section suivante.

3.1.2 Qualification de la rPDD pour les écoulements incompressibles

La qualification de la méthode rPPD a consisté en une série de comparaisons entre des simulations utilisant cette approximation avec des simulations ne l'utilisant pas. Les analyses ont été réalisées en coordonnées cartésiennes et cylindriques et sont reportées dans (ABIDE, BINOUS et al., 2017; ABIDE et al., 2018). J'ai pris le parti de conserver un maillage décalé et une formulation skew-symmetric des termes convectifs pour assurer la conservation de l'énergie cinétique (en l'absence de dissipation visqueuse). La conservation de la masse, qui revient à satisfaire la divergence à la précision machine est aussi une contrainte imposée. Or ces deux propriétés de conservation dépendantes de l'évaluation des dérivées et interpolation décalées conduisent à estimer l'influence de la troncature rPDD sur ces termes. Un des cas test considéré concerne l'écoulement d'un fluide parfait dans une boîte périodique et initialisé par un tourbillon de Taylor-Green. Il permet de vérifier la conservation de l'énergie cinétique

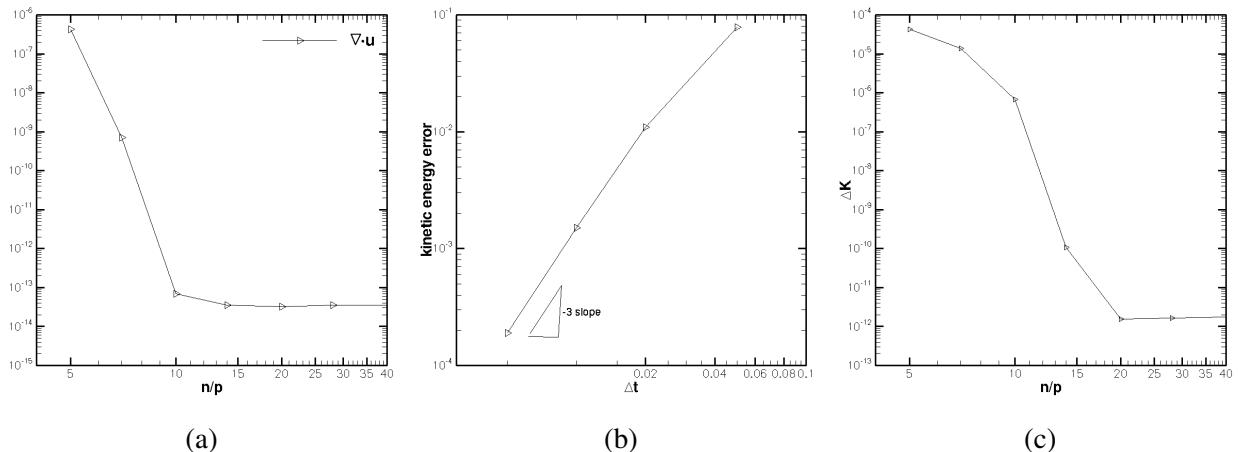


FIGURE 3.3 – Erreur introduite lors de la résolution approchée rPDD en fonction du nombre de noeuds par sous-domaine (a) sur la divergence (b) sur l'énergie cinétique et (c) conservation de l'énergie cinétique (ABIDE, BINOUS et al., 2017).

et de la masse (cf. Fig. 3.3). Les erreurs ont été relevées en fonction de plusieurs indicateurs des propriétés de conservation pour différents partitionnements n/p . La figure 3.3c démontre la propriété de conservation de l'énergie cinétique résultant du choix du maillage décalé. L'erreur introduite par la résolution approchée s'observent sur les figures 3.3a et 3.3b qui concernent la divergence et l'énergie cinétique. La décroissance exponentielle avec le nombre de points par sous-domaine est assez remarquable. L'estimation d'erreur (3.1) s'applique aux propriétés de conservation. Il convient donc de choisir un nombre de point par sous-domaine satisfaisant aux critères souhaités. En pratique, conserver une valeur de la divergence au delà de 10^{-9} semble raisonnable. Ceci conduit à retenir environ 10 à 15 points pour les schémas compacts du quatrième ordre.

L'approche rPDD me semble illustrer parfaitement l'intérêt d'exploiter la localité des schémas compacts, puisqu'il permet de limiter fortement le volume des communications. Cependant, cette solution ne permet pas de traiter les opérateurs elliptiques résultant de l'algorithme de projection (cf. section 1.4). Une première approche proposée dans mon travail repose sur une parallélisation de la méthode de diagonalisation successive. Elle est détaillée ci-après.

3.2 Algorithme de diagonalisation successive parallèle

La résolution de problèmes elliptiques est un aspect important en terme de ressource informatique. Il est assez commun que le solveur de Poisson soit l'opération la plus coûteuse lors de la simulation d'écoulements incompressibles par la méthode de projection. Ceci est amplifié lorsque des discrétisations d'ordre élevé sont utilisées. Au regard des travaux de (LAIZET et al., 2009), il m'est apparu assez naturel de paralléliser la méthode de diagonalisation successive : j'en présente les éléments essentiels dans les sections suivantes.

3.2.1 Algorithme de diagonalisation

L'algorithme de diagonalisation successive est une méthode directe de résolution des systèmes linéaires qui consiste à résoudre ce dernier dans l'espace des vecteurs propres (LYNCH et al., 1964). Il a souvent été utilisé pour l'inversion de problèmes elliptiques résultant de discrétisations spectrales (FONTAINE et al., 2014 ; MARTINAND et al., 2014 ; RASPO et al., 1996). Certains auteurs retiennent ce solveur direct lorsqu'une discrétisation compacte est adoptée (ABIDE et al., 2005 ; TYLISZCZAK, 2016 ; VEDY et al., 2003). Sur la base du formalisme tensoriel (LYNCH et al., 1964), un problème de Poisson

tri-dimensionnel s'écrit comme :

$$\left(\delta_x^2 \otimes I_y \otimes I_z + I_x \otimes \delta_y^2 \otimes I_z + I_x \otimes I_y \otimes \delta_z^2 \right) \phi = F \quad (3.3)$$

où les opérateurs de dérivation seconde δ^2 sont associés à une discréétisation spatiale (compacte ou spectrale). Il est alors classique d'opérer une diagonalisation de ces opérateurs pour chaque direction d'espace :

$$\left(\Lambda_x \otimes I_y \otimes I_z + I_x \otimes \Lambda_y \otimes I_z + I_x \otimes I_y \otimes \Lambda_z \right) \tilde{\phi} = \tilde{F} \quad (3.4)$$

avec $\tilde{\phi} = (M_x^{-1} \otimes M_y^{-1} \otimes M_z^{-1}) \phi$, $\tilde{F} = (M_x \otimes M_y \otimes M_z) F$. Les matrices de passage et les valeurs propres résultent de la diagonalisation des opérateurs de dérivation seconde $\delta^2 = M \Lambda M^{-1}$. Cette étape de diagonalisation est très coûteuse, mais elle est réalisée une seule fois en début de simulation. De plus, les matrices de passage sont en toute généralité des matrices denses. Cette approche est plutôt adaptée aux approximations globales qu'aux approximations locales puisque la nature locale est détruite par la diagonalisation. Toutefois, ce formalisme se trouve en pratique avantage par l'utilisation de librairies optimisées comme la librairie BLAS (DGEMM/ZGEMM) et particulièrement adapté aux problèmes de faible à moyenne résolution, typiquement le contexte de la simulation des grandes échelles. Je propose de paralléliser cette méthode dans ABIDE, BINOU et al. (2017), ABIDE et al. (2018) à l'aide de la décomposition en pinceaux. Ce choix est motivé par la tensorialité de la méthode de diagonalisation qui est le point commun avec le calcul des FFT (N. LI et al., 2010).

3.2.2 Décomposition en pinceaux appliquée pour la diagonalisation successive

Le calcul des transformées de Fourier fait partie des algorithmes les plus utilisés pour lequel d'importants efforts de développement ont été réalisés (N. LI et al., 2010; PEKUROVSKY, 2012). Du fait de la nature globale de la décomposition en polynômes trigonométriques intrinsèque aux transformées de Fourier, la technique de parallélisation repose sur une redistribution dynamique des données entre les processeurs : on parle de *parallélisation par données*. Ainsi, il devient possible d'appliquer un algorithme séquentiellement car l'accès mémoire est alors possible. Cette technique, présente l'avantage de pouvoir mettre en oeuvre facilement des algorithmes séquentiels. Elle est appelée décomposition en pinceaux, et est devenue populaire dans la communauté de la simulation numérique. Selon la dénomination de la librairie 2DECOMP&FFT trois états de données sont alors

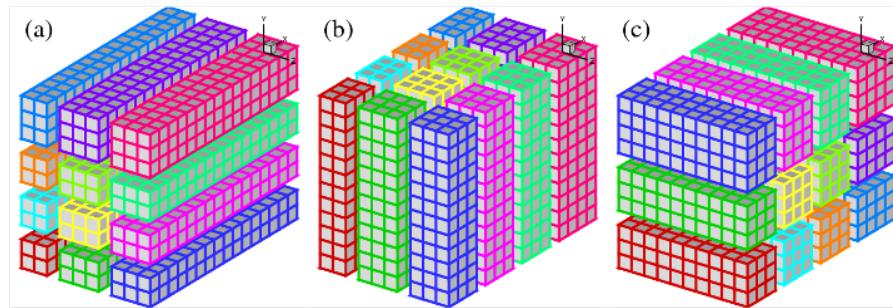


FIGURE 3.4 – Décomposition en pinceau extrait de (N. LI et al., 2010).

possibles x -pencil, y -pencil et z -pencil (cf. fig. 3.4). Compte tenu du caractère tensoriel de la méthode de diagonalisation, ce parallélisme de données est particulièrement adapté.

Ainsi, la parallélisation de la diagonalisation successive se déduit assez naturellement. Par exemple, considérons un problème de Poisson 3D et supposons que les données soient initialement distribuées en z -pencil. L'algorithme de parallélisation de la méthode est alors le suivant :

1. $S_z = (I_x \otimes I_y \otimes M_z) F$ et redistribution S_z vers y -pencil,

2. $F_y = (\mathbf{I}_x \otimes M_y \otimes \mathbf{I}_z) F_z$ et redistribution S_y vers X -pencil,
3. produit tensoriel $F_x = (M_x \otimes \mathbf{I}_y \otimes \mathbf{I}_z)$
4. calcul de la solution dans l'espace des vecteurs propres $\tilde{\phi} = (\Lambda_x^{-1} \otimes \Lambda_y^{-1} \otimes \Lambda_z^{-1})$,
5. produit tensoriel $\phi_x = (M_x^{-1} \otimes \mathbf{I}_y \otimes \mathbf{I}_z)$
6. redistribution de ϕ_x vers Y -pencil, $\phi_y = (\mathbf{I}_x \otimes M_y^{-1} \otimes \mathbf{I}_z) \phi_x$
7. redistribution de ϕ_y vers z -pencil, $\phi = (\mathbf{I}_x \otimes \mathbf{I}_y \otimes M_z^{-1}) \phi_z$

En plus des 6 produits tensoriels, cette technique de parallélisation introduit 4 redistributions dynamiques des données. Bien que pratique à mettre en oeuvre, elle ne contourne pas les limitations de la diagonalisation qui sont :

- l'hypothèse de séparabilité,
- une restriction aux problèmes à des coefficients constants,
- une complexité algorithmique de l'ordre $O((N_x N_y N_z)^2)$,

Malgré ces limitations, cette technique se montre efficace.

3.2.3 Extension aux coordonnées cylindriques

Dans le cadre de la collaboration sur les écoulements stratifiés en rotation avec S. Viazzo (Aix Marseille Univ./M2P2), nous avons mis en application cette technique pour traiter des écoulements en géométrie annulaire (ABIDE et al., 2018). La discréétisation de la direction azimuthale est alors assurée par une discréétisation pseudo-spectrale. En complément du paragraphe précédent, je présente brièvement la diagonalisation parallèle pour une équation de Poisson en coordonnées cylindriques. Considérons, le problème de Poisson en coordonnées cylindrique suivant :

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} \phi + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta^2} \phi + \frac{\partial}{\partial z^2} \phi = s \quad (3.5)$$

La direction homogène est l'azimut $0 \leq \theta < 2\pi$. La projection sur la fonction $\exp(ki\theta)$ transforme le problème (3.5) en une série de problèmes bi-dimensionnels et indépendants :

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} \hat{\phi}_k + \frac{\partial}{\partial z^2} \hat{\phi}_k - \frac{k^2}{r^2} \hat{\phi}_k = \hat{s}_k \quad (3.6)$$

Il s'agit alors de résoudre une série de problèmes bi-dimensionnels dans l'espace spectral. La discréétisation des deux directions non-homogènes à l'aide de schémas compacts et formulée dans cet espace conduit à :

$$\left(\left(\frac{1}{r} \delta_r^{fc} r \delta_r^{cf} - \frac{k^2}{r^2} \right) \otimes \mathbf{I}_z \right) \hat{s}_k + \left(\mathbf{I}_r \otimes \delta_z^{fc} \delta_z^{cf} \right) \hat{s}_k = \hat{s}_k \quad 0 \leq k < N_\theta/2 + 1 \quad (3.7)$$

A partir de la diagonalisation des opérateurs $\delta_{r,k}^2 = 1/r \delta_r^{fc} r \delta_r^{cf} - k^2/r^2$ et de δ_z^2 , et en utilisant la décomposition en pinceaux, l'algorithme de résolution se décompose en :

1. passage dans l'espace spectral $\{\hat{S}_{\theta,k}, 0 \leq k < N_\theta/2 + 1\} = FFT(S)$
2. redistribution de $\hat{S}_{\theta,k}$ sur le y -pencil, $\hat{S}_{z,k} = (P_z \otimes \mathbf{I}_r) \hat{S}_{\theta,k}$
3. redistribution de $\hat{S}_{z,k}$ sur le z -pencil, $\hat{S}_{r,k} = (\mathbf{I}_z \otimes P_{r,k}) \hat{S}_{z,k}$
4. calcul de la solution dans l'espace des vecteurs propres.
5. calcul de $\hat{\phi}_{r,k} = (\mathbf{I}_z \otimes P_{r,k}^{-1}) \hat{\phi}_{r,k}$ et redistribution de $\hat{\phi}_{r,k}$ sur le y -pencil.
6. calcul de $\hat{\phi}_{\theta,k} = (P_z^{-1} \otimes \mathbf{I}_r) \hat{\phi}_{z,k}$ et redistribution de $\hat{\phi}_{\theta,k}$ sur le x -pencil

7. Obtention de la solution dans l'espace physique par fft inverse $\phi = FFT^{-1}(\hat{\phi}_\theta)$.

L'introduction d'une direction de Fourier permet de substituer un produit tensoriel par une transformée de Fourier. Quant au nombre de redistributions dynamiques, il reste identique, c'est à dire 4.

Il est important de souligner ici les aspects mémoires liés à cette approche dans le cas cylindrique car l'opérateur radial est indexé par le nombre d'onde k . Cela implique la diagonalisation de l'opérateur $\delta_{r,k}^2 = 1/r \partial_r r \partial_r - k^2/r^2$ et dont le stockage informatique peut être rapidement limitant. Cette difficulté a été rencontrée dans la simulation des écoulements baroclines où des résolutions azimutales de l'ordre de 2048 ont été testées. Une utilisation judicieuse de la décomposition en pinceaux permet de distribuer en mémoire ces matrices de passage relaxant ainsi l'utilisation de la mémoire.

En pratique, cette méthode de diagonalisation est relativement simple à mettre en oeuvre et souple.

3.3 Préconditionnement des opérateurs elliptiques

La diagonalisation successive est limitée aux problèmes séparables et possède une complexité algorithmique incompatible avec une extensivité faible. Les paragraphes suivants montrent comment la mise en oeuvre d'une technique de préconditionnement spécifique aux schémas compacts permettrait de s'affranchir de ces difficultés. Ces développements sont détaillés dans les articles dans les articles (ABIDE & ZEGHMATI, 2017; ABIDE, 2020; ABIDE et al., 2013).

3.3.1 Introduction

La diagonalisation successive n'exploite pas la nature quasi-locale des schémas compacts. Cela justifie d'une stratégie de parallélisation des données telle que décrite au paragraphe 3.2.1. Or la complexité algorithmique de la diagonalisation successive joue en sa défaveur, car elle n'est pas linéaire, et la rend incompatible avec les nouvelles architectures dites exascales. La méthode rPDD présentée à la section 3.1 illustre comment exploiter correctement la nature quasi-locale des schémas compacts. Elle permet la réduction du volume des données communiqué entre les processeurs. La section 1.4.3 introduit pour le problème de Poisson une famille de schémas compacts de type boîte, dont la formulation invite à considérer un préconditionnement basé sur une discréttisation par différences finies d'ordre 2. Le problème discret, et son préconditionneur, sont alors spectralement équivalents. Dès lors, la résolution d'un problème elliptique de manière itérative conduit aux évaluations successives des résidus à l'aide de la méthode rPDD. D'un point de vue performance, le problème se déplace sur une implémentation efficace du préconditionneur. Dans le cadre d'approximations locales, les méthodes de type multigrille permettent d'obtenir les meilleures performances du fait de leur complexité algorithmique et de leur maturité de développement (cf. les bibliothèques HYPRE ou AGMG). Ces éléments m'ont conduit à considérer la potentialité des méthodes itératives préconditionnée.

Le préconditionnement par différences finies est une technique initialement développée pour résoudre des problèmes elliptiques résultants de discréttisation par méthodes spectrales. Ainsi CANUTO et al. (2012) montre que le préconditionnement par différences finies permet de contrôler efficacement le taux de convergence. Il est à noter que pour ce type de discréttisation le conditionnement se comporte en N^4 (CANUTO et al., 2012). Ainsi, les travaux de HALDENWANG et al. (1984) pour la méthode de collocation ou plus récemment de LABROSSE et al. (2011) identifient des préconditionnement basées sur des approximations locales telles que les VF ou EF ou mixte.

Comme mentionnée dans le chapitre 1, les méthodes itératives pour les schémas compacts sont principalement considérées pour les discréttisations multi-dimensionnelles de type Merschellen (COLLATZ, 1960). Dans ce cas, les systèmes linéaires résultants sont creux rendant pertinente l'utilisation de méthodes itératives (CROISILLE, 2013 ; J. ZHANG et al., 2002).

Dans le contexte spécifique des écoulements incompressibles, ces approches ne sont pas transposables du fait de la forme conservative de l'équation de correction de pression, entre autres. Toutefois, la technique de préconditionnement a déjà été utilisée par le passé sans y faire explicitement référence ou être systématiquement étudiée (KNIKKER, 2009 ; SCHIESTEL et al., 1995 ; WILSON et al., 2001). Ainsi le solveur de pression utilisé dans les simulations en canal turbulent par SCHIESTEL et al. (1995) repose sur cette technique de préconditionnement. Le cadre étudié est celui de l'écoulement en canal turbulent avec deux directions périodiques discrétisées par des séries de Fourier et la direction normale aux parois par schémas compacts. Ainsi dans l'espace spectral, le préconditionnement conduit à la résolution d'un problème de Poisson unidimensionnel dont la solution est obtenue par un solveur tri-diagonal. Cette approche a été retenue par KNIKKER (2009) pour la simulation d'écoulements dans des géométries comportant plusieurs directions non-homogènes. Ainsi, pour les problèmes d'Helmholtz le préconditionnement par différences finies centrées consiste à appliquer les méthodes des directions alternées. Pour le problème de Poisson, le préconditionnement consiste en l'application d'itérations d'un solveur multigrille géométrique. On notera que le préconditionnement par ordre inférieur a déjà été expérimenté par le passé en omettant toutefois analyse détaillée des taux de convergence. WILSON et al. (2001) propose une d'analyse sur la méthode Richardson préconditionnée par un solveur multigrille. Toutefois, la difficulté associée à la forme conservative de l'équation Poisson a été contournée en considérant une disposition collocative des variables. Cela permet de construire un système linéaire creux dans l'esprit originel de COLLATZ (1960) ou développé par CAREY et al. (1997)

Gardant à l'esprit le calcul massivement parallèle pour les schémas compacts, il me semble que le préconditionnement par ordre inférieur est une direction à développer. Dans les articles (ABIDE & ZEGHMATI, 2017 ; ABIDE, 2020 ; ABIDE et al., 2013) je discute, dans le cadre des schémas compacts et du problème de Poisson, cette approche par l'analyse de convergence. La ligne directrice est de combiner les performances du parallélisme de la méthode rPDD et la précision compacte. En pratique elle permet de relaxer un bon nombre d'hypothèses telles que la séparabilité, coefficients constants ou conditions aux limites de natures différentes.

3.3.2 Analyse de la convergence

Pour illustrer la technique de préconditionnement pour résoudre des problèmes elliptiques qui ne se prêtent pas à la diagonalisation successive, j'introduis la méthode itérative de Richardson. La discrétisation par des schémas compacts d'un problème elliptique conduit à inverser le système linéaire $L\phi = f$. On considère la discrétisation de ce même problème elliptique à l'aide des différences finies centrées d'ordre 2 ; on note formellement cet opérateur L_{loc} . La méthode de Richardson préconditionnée consiste à évaluer la séquence $\phi^{(k)}$:

$$L_{loc}\phi^{(k+1)} = L_{loc}\phi^{(k)} - \omega(L\phi^{(k)} - f) \quad (3.8)$$

où ω est un coefficient de relaxation. La matrice d'itérations G est alors définie par :

$$G = I - \omega L_{loc}^{-1} L \quad (3.9)$$

dont le rayon spectral conditionne la convergence. Le résultat classique concerne la convergence optimal qui est décrite par :

$$\omega_{opt} = \frac{2}{\lambda_{max} + \lambda_{min}} \quad \rho_{opt} = \frac{\lambda_{max} - \lambda_{min}}{\lambda_{max} + \lambda_{min}} \quad (3.10)$$

où ω_{opt} et ρ_{opt} sont respectivement le facteur de relaxation optimal et le rayon spectral associé. Ce dernier permet d'évaluer le taux de réduction du résidu. Lorsque l'on considère la discrétisation du problème de Poisson unidimensionnel sur un domaine périodique, il est possible de calculer les valeurs propres des opérateurs L et L_{loc} . Elles se déduisent de l'analyse en nombre d'onde du schéma

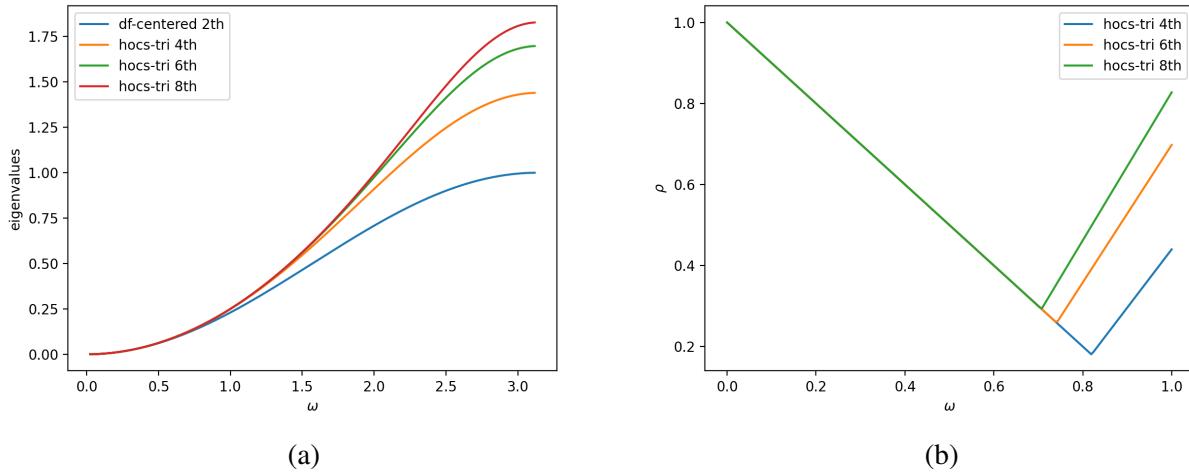


FIGURE 3.5 – Valeurs propres du problème de Poisson discret préconditionné $L_{loc}^{-1}L$ (a) et taux de convergence (b).

au différences finies. La figure 3.5a présente les valeurs propres discrètes pour quelques schémas compacts et schémas centrés d’ordre 2. Pour ces mêmes discrétilisations, le rayon spectral de la matrice d’itérations est représenté figure 3.5b en fonction du facteur de relaxation. Ainsi, le facteur de relaxation et le taux de convergence optimal sont données par :

$$(\omega_{opt}, \rho_{opt})_{4th} = (0.83, 0.183) \quad (\omega_{opt}, \rho_{opt})_{6th} = (0.74, 0.26) \quad (\omega_{opt}, \rho_{opt})_{8th} = (0.71, 0.29)$$

On observe que le taux de convergence est indépendant de la dimension N du maillage. Autrement dit, une mise en oeuvre performante de L_{loc}^{-1} combinée à une évaluation du résidu efficace, telle que la rPDD, ouvre des perspectives en accord avec la nature locale des schémas compacts. Il s’agit là d’un axe de recherche que je mène depuis l’article (ABIDE et al., 2012). Je présente ci-dessous deux de mes contributions (ABIDE & ZEGHMATI, 2017; ABIDE, 2020) dans lesquelles je développe de telles analyses.

3.3.3 Problèmes elliptiques à coefficients constants

Dans le même esprit que le précédent paragraphe, je propose dans (ABIDE & ZEGHMATI, 2017) une analyse de convergence d’un processus itératif pour un problème d’Helmholtz/Poisson en dimension 2. Plus particulièrement, je considère le schéma itératif suivant :

$$\phi^* = \phi^{(k)} - T \left(L\phi^{(k)} - c \right) \quad (3.11)$$

$$\phi^{(k+1)} = \phi^* - L_{loc}^{-1} (L\phi^* - c) \quad (3.12)$$

où L et L_{loc} font tous deux références aux problèmes discrets d’ordre élevé (schémas compacts) et d’ordre inférieur (différences finies d’ordre 2). L’opérateur T est une étape de relaxation soit de Jacobi ou de factorisation LU incomplète, basée sur L_{loc} la discrétilisation d’ordre 2. Le paramètre de relaxation ω est introduit par l’opérateur de relaxation T . La matrice des itérations de ce processus itératif est donnée par $G = (I - L_{loc} - 1L') (I - TL^{-1})$ (AUZINGER et al., 1982). L’analyse du rayon spectral de G renseigne le taux de convergence. Bien qu’étant en dimension 2, pour un domaine de calcul périodique les opérateurs discrets L et L_{loc} partagent les mêmes vecteurs propres. Cela permet d’exprimer le rayon spectral G dans le cas où L résulte de la discrétilisation par schémas compacts. Les expressions analytiques sont présenté dans (ABIDE & ZEGHMATI, 2017) pour les schémas compacts d’ordre 4 sur maillage décalé. Le résultat principal de cette analyse peut se résumer à la figure 3.6

qui fournit le taux de convergence en fonction du paramètre de relaxation pour les deux méthodes de relaxation Jacobi et *LU*. On en déduit alors le paramètre optimal ω pour chaque méthode de relaxa-

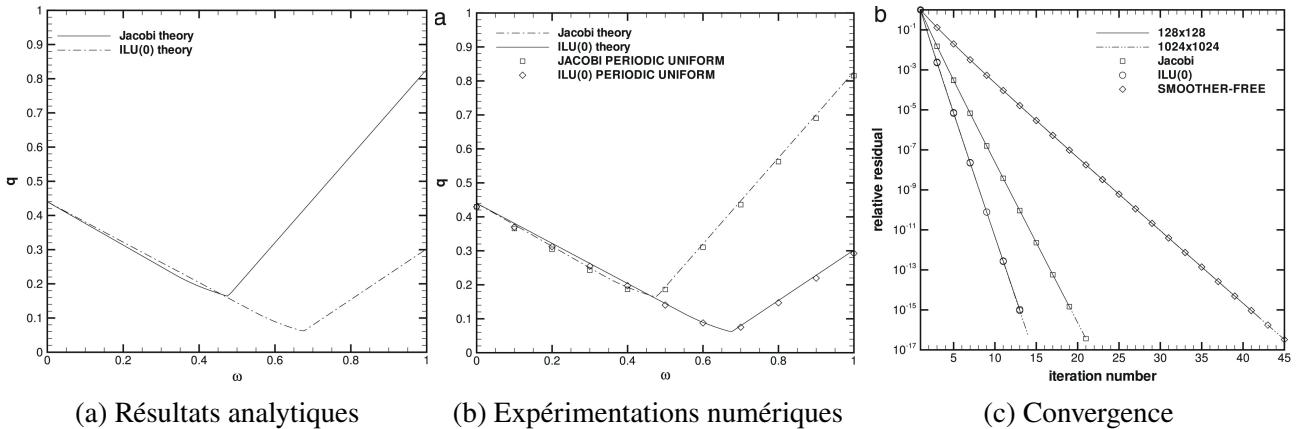


FIGURE 3.6 – Analyse du taux de convergence analyse théorique et validation.

tion : $(\omega_{opt}, r_{opt}) = (0.47, 0.16)$ et $(0.67, 0.06)$. Cette analyse a été validée par des expérimentations numériques pour un maillage uniforme et un domaine périodique. Pour cela on détermine le taux de convergence à partir des courbes de résidus figure 3.6c pour les opérateurs de relaxation Jacobi et *ILU*. On note que le taux de convergence est indépendant du pas d'espace, qui est une propriété attendue. Cela permet de comparer les taux de convergence pour plusieurs paramètres de relaxation (cf. Fig. 3.6c). On observe alors que les taux de convergence sont en parfait accord avec les prédictions théoriques. On notera aussi que le meilleur taux de convergence est de $r_{opt} = 0.06$ avec la relaxation *ILU*. C'est à comparer au taux de convergence $r_{opt} = 0.44$ pour la méthode de Richardson préconditionnée ($\omega = 0$), soit une amélioration d'un facteur 7.

Des expérimentations numériques complémentaires ont été réalisées pour discuter des performances du processus itératif lorsque les hypothèses de l'analyse spectrale ne sont plus vérifiées. La figure 3.7 présente le résultat de l'étude de convergence pour des conditions aux limites de type Neumann et un maillage fortement non-uniforme. On constate que dans ce cas il est nécessaire d'utiliser

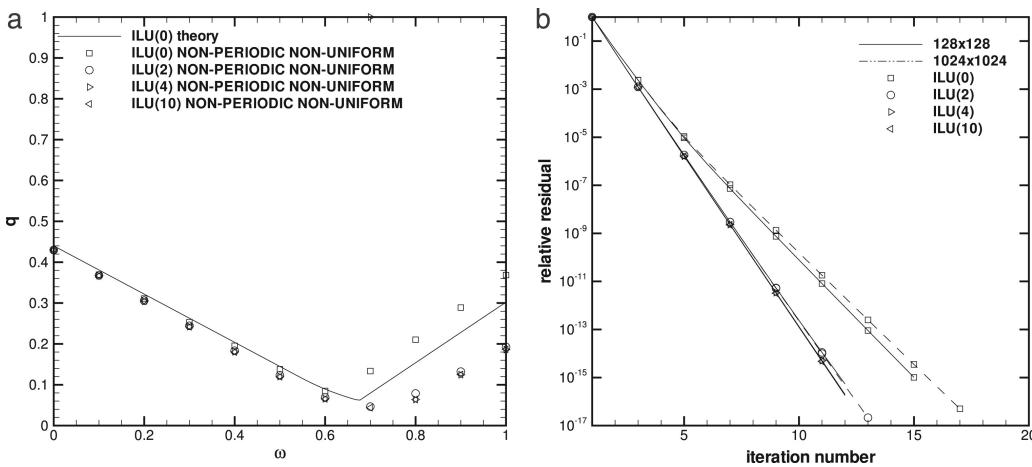


FIGURE 3.7 – Analyse du taux de convergence analyse théorique et validation - maillahe non-uniforme et conditions aux limites de type Neumann).

une méthode de relaxation *ILU* avec une largeur de remplissage supérieure pour retrouver le comportement théorique. Cependant les taux de convergence restent proches des ceux attendus.

Pour l'ensemble des résultats présentés, L_{loc}^{-1} représente 1 à 2 itérations du solveur multigrille algé-

brique AGMG¹. C'est une particularité tout à fait remarquable car elle rend cette technique attractive en terme de complexité algorithmique. En effet, la complexité algorithmique des solveurs multigrilles est linéaire ou log-linéaire. Combinée à une évaluation des résidus (schémas compacts) qui est elle aussi linéaire conduit à une méthode itérative globale qui hérite d'une complexité algorithmique plus avantageuse que celle de la diagonalisation successive. La figure 3.8 illustre cette propriété en représentant l'erreur numérique en fonction du temps de cpu nécessaire à la résolution.

Ce prérequis indispensable pour aborder le calcul massivement parallèle, et plus particulièrement la

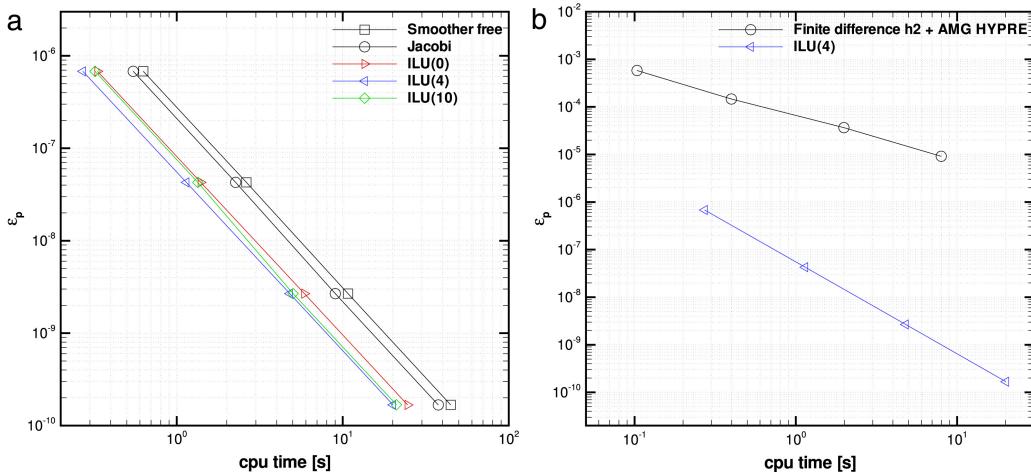


FIGURE 3.8 – Erreurs numériques en fonction du temps cpu, pour les relaxation de Jacobi et ILU (a) et comparaison avec une discréttisation classique à l'ordre 2 (b).

propriété d'extensibilité faible. Cette approche permet à priori de traiter des problèmes elliptiques plus complexes. En effet, le préconditionnement de bas ordre peut inclure des conditions limites différentes sur toute la frontière, de traiter des problèmes à coefficients variables soit plus généralement des problèmes non-séparables.

J'ai pris cette direction de travail pour étendre la méthodologie précédente à la résolution de problèmes non séparables avec des applications en mécanique des fluides (ABIDE, 2020) et des problèmes proches de la mécanique du contact (ABIDE, MANSOURI et al., 2021). La section suivante présente cette extension.

3.3.4 Problèmes elliptiques à coefficients variables

La technique de préconditionnement présentée au paragraphe précédent s'étend aisément aux ordres de discréttisation supérieures à 4 et pour des problèmes elliptiques plus généraux. Ainsi il devient envisageable de résoudre des problèmes elliptiques à coefficients variables dans le même esprit que LABROSSE et al. (2011) pour les discréttisations spectrales en géométries déformées. C'est ce travail que j'ai développé dans (ABIDE, 2020) en considérant le problème de Poisson singulier à coefficient variable. L'objectif est de pouvoir traiter, entre autres, des simulations numériques d'écoulements quasi-incompressible par le modèle bas nombre de Mach, pour lesquels il est nécessaire de résoudre des équations de la forme :

$$-\nabla \cdot \kappa \nabla \phi = \nabla \cdot \mathbf{u}^* - S \quad (3.13)$$

κ est un coefficient variable suffisamment régulier et \mathbf{u}^* un champ de vitesse intermédiaire (cf. section 1.1.3). Dans le cadre de la méthode de Richardson (3.8) le préconditionnement DFC d'ordre 2 est premièrement analysé pour différents schémas compacts de l'ordre 4 à 10 d'une manière analytique. L'argument du raisonnement est que les opérateurs de Poisson discret résultant de d'ordre 2 ou des schémas compacts ont des vecteurs propres identiques. Le tableau 3.1 fournit les paramètres

1. notay

optimaux de convergence. On notera que les taux de convergence décroissent lorsque l'ordre du

scheme	H4tri	H6tri	H6pen	H8tri	H8pen	H10pen
λ_{min}	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
λ_{max}	1.44	1.70	1.62	1.83	1.84	1.95
r_{opt}	0.18	0.26	0.24	0.29	0.30	0.32
ω_{opt}	0.82	0.74	0.76	0.71	0.70	0.68

TABLE 3.1 – Les valeurs propres extrêmes de l'opérateur préconditionné $L_{loc}^{-1}L$ et les paramètres optimaux du procédé itératif de Richardson.

schéma augmente. Pour le schéma compact d'ordre 4 tridiagonal, la convergence est de 0.18 alors que pour l'ordre 10 pentadiagonal la convergence optimale est de 0.32. Bien que la convergence soit dégradée, la précision élevée du schéma d'ordre 10 rend tout de même la discréétisation compétitive.

Les propriétés de convergence dans le cas où un coefficient de diffusion variable est également analysée. Cependant, l'introduction du coefficient variable κ ne permet pas de déterminer les valeurs propres de la matrice d'itérations de façon analytique. On a recours à un calcul *brut de force* qui consiste à assembler l'opérateur $L_{loc}^{-1}L$ pour en déterminer le rayon spectral. Dans un premier temps, l'analyse du préconditionnement est menée pour deux coefficients variables κ :

$$\kappa_1(x) = 1 + \frac{9}{10} \sin(4\pi x) \quad (3.14)$$

$$\kappa_2(x) = \frac{2}{1 + \epsilon + (1 - \epsilon) \sin(4\pi x)} \quad (3.15)$$

où ϵ est un paramètre caractéristique de la raideur du problème ($\epsilon = 10^{-3}$). Le coefficient κ_2 présente une variation de l'ordre de 3 ordres de grandeur tout en étant continue. Pour un domaine périodique, le résultat du calcul des valeurs propres est reporté dans le tableau 3.2. Ce tableau indique qu'un coef-

case	scheme	H4tri	H6tri	H6pen	H8tri	H8pen	H10pen
κ_1	λ_{min}	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
κ_1	λ_{max}	1.44	1.70	1.62	1.83	1.85	1.95
κ_2	λ_{min}	0.99	0.99	0.99	0.99	0.99	0.99
κ_2	λ_{max}	1.45	1.70	1.62	1.83	1.85	1.95

TABLE 3.2 – Les valeurs propres extrêmes de l'opérateur préconditionné $L_{loc}^{-1}L$ et les paramètres optimaux du procédé itératif de Richardson : conditions aux limites périodiques et coefficient variable.

ficient variable et continu ne modifie pas les valeurs propres extrêmes et par conséquent les propriétés de convergence du processus itératif.

Ces prévisions quasi-analytiques ont été confirmées par des expérimentations numériques basées sur la résolution de problèmes de Poisson en dimension 3. J'invite le lecteur à consulter l'article (ABIDE, 2020) pour une analyse détaillée des résultats.

Pour conférer une plus grande généralité à cette analyse de convergence, j'ai proposé une étude de l'efficacité du préconditionnement dans un contexte de simulation d'écoulements à bas nombre de Mach. La discréétisation des équations de Navier-Stokes est assurée par un algorithme de projection (KNIKKER, 2011 ; NICOUX, 2000) dont la description est donnée à la section 1.1. Cette approche introduit naturellement un problème de Poisson de la forme (3.13), à coefficient variable, pour satisfaire la contrainte sur la divergence. Après validation du solveur bas nombre de Mach sur une cavité différenciellement chauffée stationnaire (ABIDE, 2020), l'écoulement instationnaire dans une cavité à grand

rapport de forme (1 :8) a été simulé. La figure 3.9 présente des champs instantanées de la température à différents instants pour les paramètres de contrôle suivant ($Ra, \epsilon, Pr = (10^6, 0.8, 0.71)$). Les champs

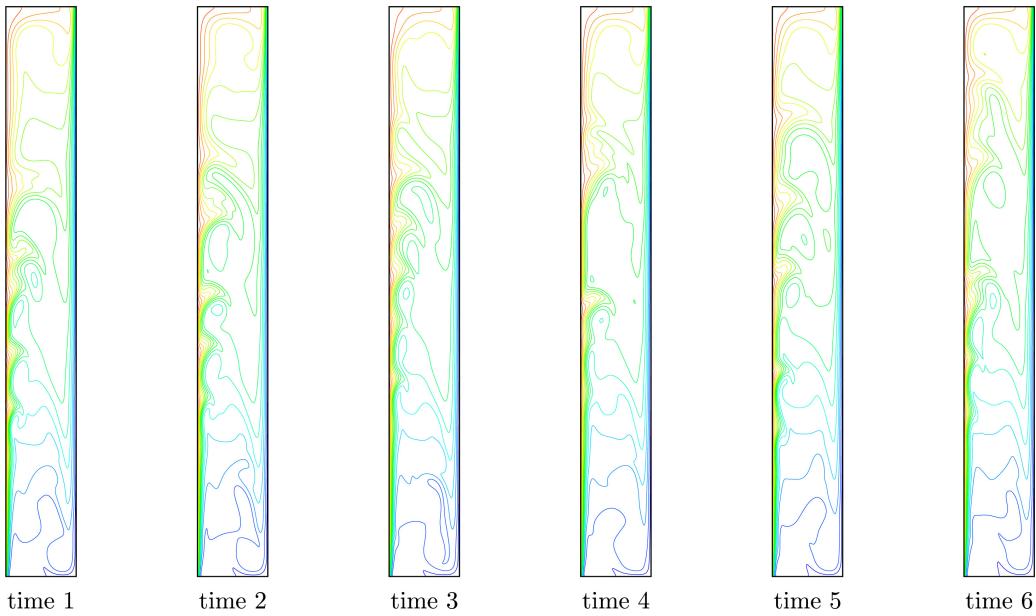


FIGURE 3.9 – Série temporelle d’instantanées du champ de température (ABIDE, 2020).

de température illustrent le développement des structures le long des parois de la cavité. Il indique aussi le degré de régularité de la densité de qui intervient dans l’équation (3.13). Pour ce problème, la convergence de la méthode de Richardson et les taux de convergence sont déterminés à partir des

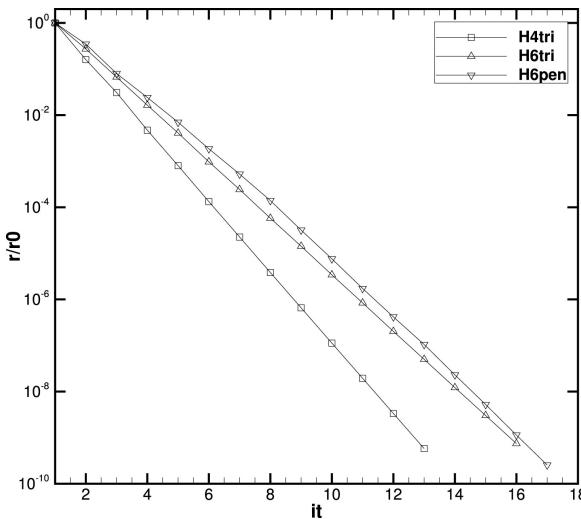


FIGURE 3.10 – Historique du résidu pour l’écoulement en cavité différentiellement chauffée (ABIDE, 2020).

courbes de résidu pour les schémas compacts d’ordre 4 et 6 (cf. Fig. 3.10). Le taux de convergence effectif évalué à partir de l’historique des résidus est proche des prédictions semi-analytiques présentées dans le tableau 3.2.

Ce travail autour du préconditionnement de bas ordre démontre que cette technique peut être envisagée pour le calcul massivement parallèle. Cela résulte du caractère quasi-local des schémas compacts qui peut être exploitée par préconditionnement de bas ordre. La partie implicite du calcul est portée par le solveur de Poisson discrétisé à l’ordre 2, et donc sur une approximation locale. De

plus, les différentes expérimentations menées montrent que l'approche s'avère robuste : il est possible de traiter des maillages avec un fort taux de compression par exemple.

3.4 Vers un code recherche orienté Calcul Haute Performance

Les infrastructures de calcul haute performance sont incontournables pour notre communauté de la mécanique numérique. A l'instar de nombreuses disciplines scientifiques, le développement/maintien d'un code de recherche peut être considéré comme le produit d'une activité de recherche. La difficulté principale, me semble-t-il, est la recherche d'un équilibre entre les performances, une simplicité d'utilisation/modification et un spectre d'applications large. En tenant compte de ces contraintes, j'ai développé le code calcul HOCS³ dédié à la simulation numérique d'écoulements et regroupant la plupart des contributions méthodologiques de ce chapitre. Dans ce paragraphe j'en présente les principales caractéristiques.

3.4.1 HOCS³ un code de recherche

Le recourt au calcul haute performance (HPC) pour les discréétisations d'ordre élevé est légitimé par les défis soulevés en par les problématiques en mécanique des fluides (instabilités, turbulence). L'implémentation de nouvelles méthodes numériques sur des environnements HPC est exigeante. Dans le contexte des solveurs incompressibles pour les approximations globales (spectrales) et quasi-locales (schémas compacts), ces contraintes conduisent au développement de codes recherche pour des domaines de calcul cubiques. C'est une conséquence des performances et simplicité d'utilisation de la décomposition en pinceaux proposée par les librairies DECOMP&FFT (N. LI et al., 2010) ouP3DFFT (PEKUROVSKY, 2012). En effet la recherche de performance est conditionnée par le choix des méthodes numériques (diagonalisation, FFT) qui restreignent les domaines géométriques à une "boîte à chaussures". Ci-après, je présente deux codes open-source pour la simulation des écoulements turbulents qui ont guidé le développement de mon code recherche.

NSCouette : Il s'agit d'un code de calcul pour la simulation des écoulements turbulents de Taylor-Couette (LOPEZ et al., 2020). Les équations de Navier-Stokes sont discréétisées en coordonnées cylindriques par la méthode spectrale de Fourier-Galerkin dans les directions axiales et azimutales, et par des différences finies centrées d'ordre 4 dans la direction radiale. Ce choix permet de réduire les problèmes d'Helmholtz et de Poisson résultant de la méthode de projection en problèmes 1d dans l'espace spectral. Le code est parallélisé à l'aide d'une stratégie hybride MPI-OpenMP reposant sur une décomposition 1d (*slab*) pour laquelle des tests de scaling ont été menés jusqu'à 20k processeurs.

Incompact 3D/ Xcompact : Ce code reste une référence en matière d'ordre élevé et de calcul haute performance (LAIZET et al., 2011). La discréétisation peut être tridimensionnelle sans aucune hypothèse de périodicité, et les termes diffusifs sont explicites. Le solveur de Poisson d'ordre élevé est basé sur un solveur rapide FFT d'une très grande efficacité. Il s'ensuit que le paradigme de parallélisation associé à ces développements est la décomposition en pinceaux (*pencil*). La contrepartie de cette efficacité est une certaine limitation associée au raffinement du maillage (1 seule direction possible), ou au choix d'une disposition des variables semi-décalée. Les récents développements permettent d'offrir à la communauté une version pour les écoulements faibles compressibles (BARTHOLOMEW et al., 2020).

Cette sélection me semble illustrer les difficultés rencontrées lorsque l'on considère des méthodes d'ordre élevé qui contraignent le domaine d'applicabilité. Comme point de comparaison, la maturité du projet NOTUS-CFD² ou encore openLBM (M. J. KRAUSE et al., 2021) illustre cette grande flexibilité

2. <https://notus-cfd.org>

lorsque que l'on considère des approximations locales. Dans le cadre de mon activité de recherche je développe et maintiens un code, HOCS³, avec les contraintes suivantes :

- discrétisation d'ordre élevé,
- calcul haute performance,
- discrétisation semi-implicite et disposition entrelacée.

De plus, ce code doit permettre de tester de nouvelles approches méthodologiques et de produire des simulations selon des configurations variées. Le compromis que je tente de maintenir résulte de plusieurs évolutions issues des encadrements de thèses et de stages de Master. Les grandes lignes du développement du code HOCS³ ont été :

1. différences finies centrées / volumes finies d'ordre 2 2D/3D (M. S. BINOUS, 2017; CHABANI et al., 2017; CHABANI et al., 2015),
2. schémas compacts 3D cartésien, (M. S. BINOUS, 2017),
3. schémas compacts 2.5D cartésien, (DOUKKALI, 2021),
4. schémas compacts 2.5D cylindrique. (ABIDE et al., 2018).

Le code *HOCS*³ repose sur la programmation objet du Fortran 90 permettant un certain niveau d'abstraction. Le parallélisme de données de la décomposition en pinceaux est utilisé par la diagonalisation successive, ou le calcul des contributions explicites (dérivations et interpolations) à l'aide des schémas compacts en approximation globale. L'approche rPPD repose, quant à elle, sur une parallélisation de type algorithmique avec une zone d'échange des données locale de type fantôme. Sur la base de ces deux schémas de communication, on implémente les solveurs Navier-Stokes souhaités avec une relative simplicité. A titre illustratif, la figure 3.11 présente des résultats du stage de H. Sadmi qui concernait l'approximation faible nombre de Mach pour les récepteurs solaires à concentration (projet avec A. Toutant UPVD/PROMES).

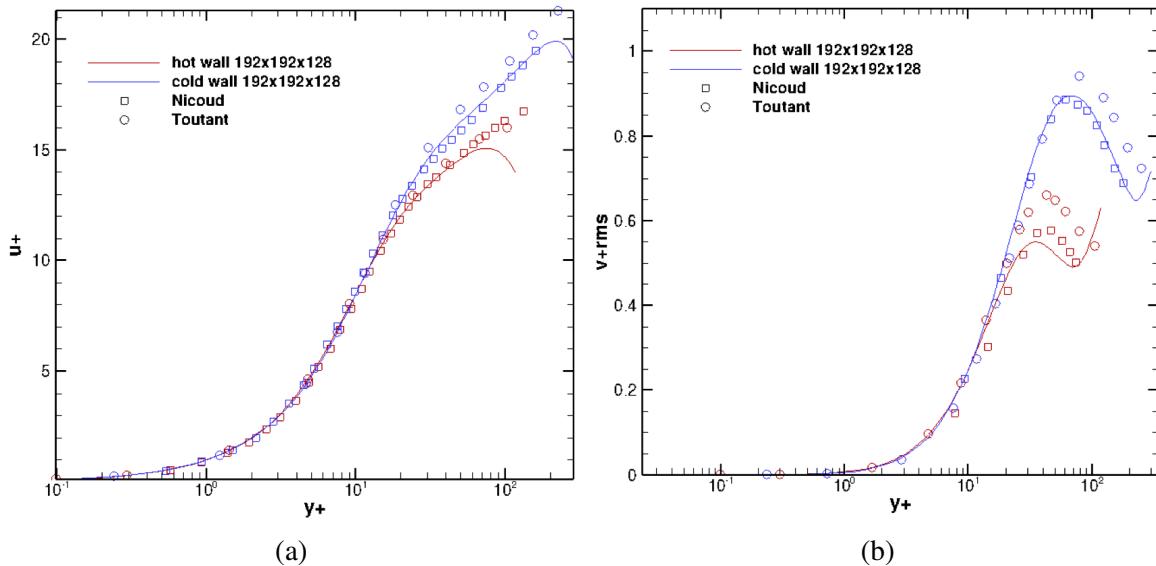


FIGURE 3.11 – Sélection de statistiques d'un écoulement turbulent en présence d'un fort gradient de température ($Re_\tau = 180$) (NICOUUD, 2000).

3.4.2 Éléments sur les performances

La qualification des performances est un point important pour les méthodologies présentées. Elle résulte de la bonne mise en oeuvre informatique des concepts développés dans ce chapitre. Ainsi, la figure 3.12 présente un test de scalabilité forte pour la méthode de diagonalisation successive et la méthode rPDD. Ces tests de performance ont été réalisés sur la machine OCCIGEN du CINES.

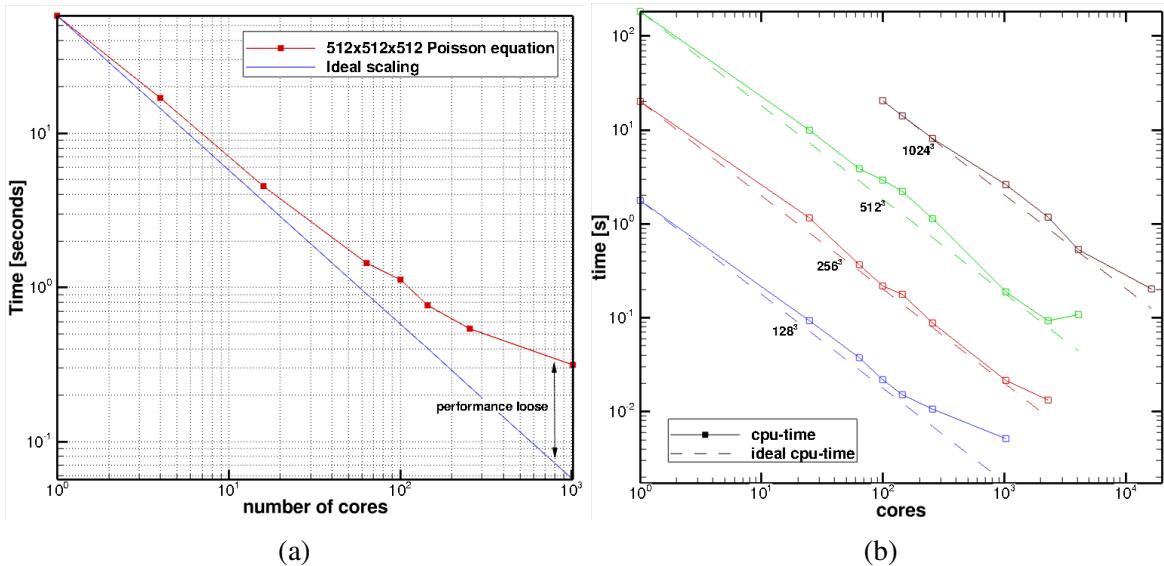


FIGURE 3.12 – Courbes de scalabilité forte (a) diagonalisation successive (b) évaluation rPDD (ABIDE, BINOUS et al., 2017).

La figure 3.12a présente le test scalabilité de la diagonalisation successive qui a été réalisé avec un maillage de 512^3 . On constate une perte d’efficacité du parallélisme pour les nombres de processeurs les plus élevés. Elle est associée au volume de communication des redistributions dynamiques des données de la décomposition en pinceaux. La figure 3.12b présente le résultat des tests de scalabilité pour la méthode rp DD pour l’évaluation des termes convectifs. De fait, elle exploite ce caractère local des schémas compacts. Cela se traduit par une meilleure scalabilité observable jusqu’à 16000 processeurs car le schéma de communication repose exclusivement sur des communications locales. La figure 3.13 présente les courbes de scalabilité pour le solveur en coordonnées cylindriques et présenté dans l’article (ABIDE et al., 2018). On notera que l’on observe comportement similaire pour

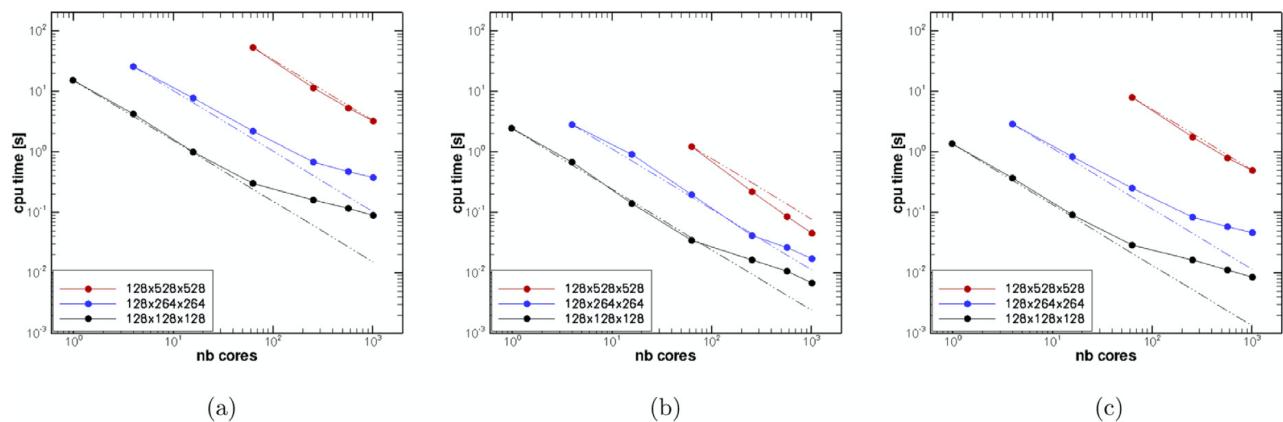


FIGURE 3.13 – Courbes de scalabilité forte pour le solveur cylindrique (a) 10 itérations temporelles (b) évaluation rPDD (c) diagonalisations successives(ABIDE et al., 2018).

les courbes de scaling. Ces deux résultats de scaling illustrent l’importance de traiter les discrétilisations en tant qu’approximation quasi-locale. Ces observations confortent la stratégie du préconditionnement de bas ordre puisque son taux de convergence est indépendant de la taille du maillage. Il reste alors à identifier le point d’inversion entre ces deux méthodes, i.e la taille de maillage pour laquelle les temps cpu entre diagonalisation successive et préconditionnement de bas ordre sont identiques.

3.5 Conclusions et perspectives

Ce chapitre décrit les principaux résultats issus de la stratégie développée pour concilier les schémas d'ordre élevé, le calcul haute performance et une relative flexibilité. La nature locale des schémas compacts est ainsi exploitée par la technique d'évaluation des opérateurs rPDD et par le préconditionnement de bas ordre pour les problèmes elliptiques. L'idée de l'approche rPDD est de réduire les volumes de communications en évitant le parallélisme par données (décomposition en pinceaux) pour favoriser un parallélisme algorithmique (décomposition halo). Bien qu'introduisant une approximation, il est possible de contrôler l'erreur induite pour ne pas dégrader les propriétés de conservation pour les solveurs de navier-Stokes incompressible. Pour les problèmes elliptiques, je propose une méthode de diagonalisation parallèle. Bien que basée sur un parallélisme par données, sa simplicité de mise en oeuvre et son efficacité pour des problèmes de dimensions modérées en font une technique centrale de ma stratégie de recherche. C'est grâce à ces deux techniques que j'ai pu produire des simulations pour différentes configurations : du problème cartésien en 3D, au problème en coordonnées cylindriques en 2.5D. L'ensemble de ces techniques se matérialise en un code de recherche HOCS³.

Par ailleurs, j'analyse les performances du préconditionnement de bas ordre pour les problèmes elliptiques. L'objectif final serait de traiter efficacement des problèmes plus généraux impliquant des problèmes non-séparables. Les premiers résultats obtenus me semblent assez convaincants : on peut allier complexification de modèle et complexité algorithmique linéaire. Cette dernière propriété est le prérequis essentiel pour envisager des maillages de dimension supérieure.

Les perspectives de ce travail s'articulent en deux volets. Le premier volet consiste en une rétroconception du code actuel pour atteindre le maximum de performances de la diagonalisation successive en s'appuyant notamment sur l'hybridation MPI/OpenMP. Un tel travail serait à réaliser avec l'appui de spécialistes en optimisation et devrait conduire à une diffusion de type open source.

Le deuxième volet concerne la mise en oeuvre de préconditionneurs de bas ordre pour des écoulements d'intérêt. Ceci permettra une comparaison pertinente avec la diagonalisation successive. La question de l'existence d'un préconditionneur optimal se pose alors naturellement. Cette technique semble intéressante pour traiter des modélisations complexes et sortant du cadre de la mécanique des fluides (cf. chap. 5).

CHAPITRE 4

QUELQUES SIMULATIONS D'ÉCOULEMENTS

L'objet de ce chapitre est d'illustrer la technique de diagonalisation successive parallèle et la méthode d'évaluation des schémas compacts rPDD en présentant une sélection de résultats de quelques simulations numériques. Les simulations présentées me semblent souligner la diversité des configurations étudiées qui couvrent les systèmes de coordonnées cartésiennes et cylindriques avec une dimensionnalité 3D et 2,5D. Ce travail de production a été principalement réalisé durant la formation doctorale des étudiants M.S. Binous, H. Doukkali et G. Melleti. Par ailleurs, il inclut un aspect collaboratif sur la thématique des écoulements stratifiés en rotation avec les université d'Aix-Marseille/M2P2 et BTU-Cottbus/LAS. Ce chapitre s'articule autour de trois sections. La première est dédiée aux écoulements en milieux confinés tandis que les deux dernières sont consacrées aux écoulements stratifiés soumis à la rotation.

4.1 Écoulements en milieux confinés

Les travaux rapportés ci-après correspondent aux premières simulations utilisant les méthodologies présentées au chapitre 2 : diagonalisation successive parallèle et évaluation rPPD des schémas compacts. Elles ont été menées sous ma responsabilité par M. Binous et H. Doukkali durant leur thèse portant sur une thématique du laboratoire, à savoir l'énergétique de l'habitat. Compte tenu des ressources informatiques limitées dont nous disposions alors, l'approche par Simulation des Grandes Échelles a été retenue.

4.1.1 Cavité ventilée de Nielsen

Contexte et motivations. D'un point de vue historique, les années 70 marquent le début de travaux de recherche en modélisation numérique en aédraulique des bâtiments. Un des modèles simplifiés pour l'étude de ces écoulements est celui d'un domaine cubique avec une buse d'injection et une évacuation d'air. Il permet de reproduire quelques spécificités de l'aédraulique associée telles qu'une forte anisotropie de l'écoulement moyen ainsi que des zones de transition à la turbulence. Lorsque les effets de flottabilité sont inclus dans la modélisation, cet écoulement est caractérisé par un véritable régime mixte de convection mettant en défaut les modélisations statistiques classiques comme le souligne la littérature récente (BLOCKEN, 2018).

Le recours à la simulation et l'expérimentation a donc été nécessaire afin d'appréhender et d'améliorer les capacités de prévision des modèles RANS. Parmi les pionniers, SAKAMOTO et al. (1980) présentent les premières simulations des grandes échelles (LES) de ce type d'écoulement. D'autres simulations ont été réalisées dans les décennies suivantes avec comme objectif principal une carac-

térisation de la cinématique de l'écoulement (CHEN et al., 1990; EMMERICH et al., 1998; EZZOUHRI et al., 2009; W. ZHANG et al., 2000). Ces simulations reposent principalement sur les approches aux volumes finis ou différences finies, avec parfois un recours aux logiciels commerciaux (LIMANE et al., 2015). A notre connaissance, il n'existe pas de simulations réalisées avec des schémas d'ordre élevé incluant trois directions d'espace non-homogènes. La simulation de ces écoulements confinés se révèle être particulièrement exigeante pour les schémas d'ordre élevé en dépit de son apparence simplicité. Ainsi, dans le cadre de la thèse de M.S. Binous nous avons retenu la cavité de NIELSEN et al. (1979) afin d'illustrer les possibilités du solveur que nous avons alors développé.

Configuration géométrique et hypothèse. La cavité rectangulaire tridimensionnelle qui fait l'objet de notre étude est similaire à celle considérée par (NIELSEN et al., 1979). Le modèle physique est présenté sur la figure 4.1. La hauteur de la cavité est notée H , la largeur $W = H$ et la longueur $L = 3H$.

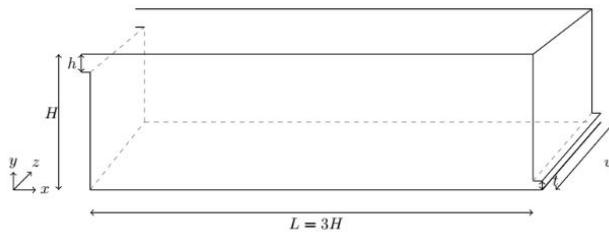


FIGURE 4.1 – Géométrie de la cavité ventilée ou cavité de Nielsen.

L'orifice d'entrée, d'une largeur $h = 0,056H$, est situé en haut de la paroi gauche. L'orifice de sortie de largeur $f = 0,16H$ est quant à lui localisé dans la partie inférieure de la paroi droite. Les largeurs des ouvertures d'entrée et de sortie sont égales à la largeur de la cavité W .

Le fluide considéré est de l'air et les vitesses caractéristiques sont suffisamment faibles pour pouvoir considérer l'écoulement comme incompressible. Les conditions aux limites sur les parois traduisent l'adhérence du fluide. Pour les conditions aux limites d'entrée, nous avons considéré deux modèles d'écoulement de sortie de buse : laminaire et turbulent. Les conditions instantanées de vitesse à l'entrée de la cavité ont été prescrites en générant une turbulence artificielle à l'aide de la *Synthetic Eddy Method* de KLEIN et al. (2003). Pour la condition aux limites de sortie au niveau de la paroi droite de la cavité, des conditions de type convectif ont été implémentées.

L'adimensionnalisation des équations est basée sur les grandeurs de références suivantes : largeur de l'ouverture de l'entrée h , vitesse de référence à l'entrée u_{ref} , viscosité cinématique ν de l'air. Ces choix conduisent à la définition du nombre de Reynolds par $Re = hu_{ref}/\nu$

Afin de s'affranchir des résolutions importantes nécessaires pour atteindre une simulation pleinement résolue, l'approche par simulation des grandes échelles (LES) a été privilégiée. Pour cela, le modèle classique WALE a ainsi été retenu et implémenté (DUCROS et al., 1998).

Dans le cadre de la thèse de M.S. Binous, deux configurations de cavité ont été étudiées. Je présente ici les principaux résultats obtenus dans le cas d'une cavité isotherme correspondant aux travaux expérimentaux de NIELSEN et al. (1978).

Sélection de résultats. L'écoulement en cavité isotherme a été simulé pour le nombre de Reynolds $Re = 4800$ comme dans l'expérience de NIELSEN et al., 1978. Les auteurs indiquent que les expériences montrent que l'écoulement n'est pas laminaire en sortie de buse. Nous avons donc implémenté la méthode Synthetic Eddy Method (KLEIN et al., 2003) permettant de générer des champs de vitesses instantanées tout en satisfaisant des moments statistiques d'ordre 1 et 2 caractéristiques de l'écoulement en sortie de buse. La taille du maillage est de $192 \times 64 \times 64$ avec un raffinement près de parois. Les temps d'intégration sont de l'ordre de 60 s pour réaliser les statistiques. L'isosurface du critère Q

d'un champ instantané représenté sur la figure 4.2 illustre la structure de l'écoulement. On observe le

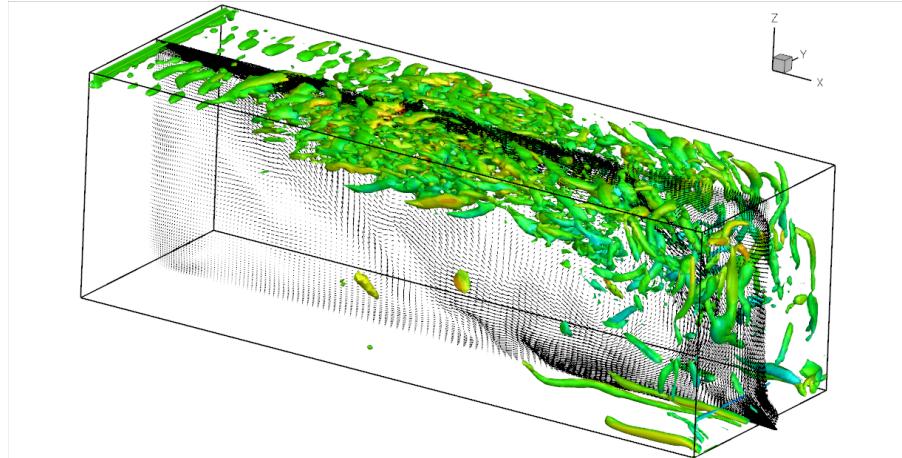


FIGURE 4.2 – Isosurface du critère Q (M. S. BINOUS et al., 2016).

développement de structures transversales inhérentes au jet de paroi engendré par la buse. De même, on observe l'effet du changement direction imposé par la paroi droite de la cavité sur ces structures transversales. Les lignes de courant moyennes et la composante de vitesse longitudinale moyenne sont présentées sur la figure 4.3. Le champ de vitesse moyen et les lignes de courant associées montrent la

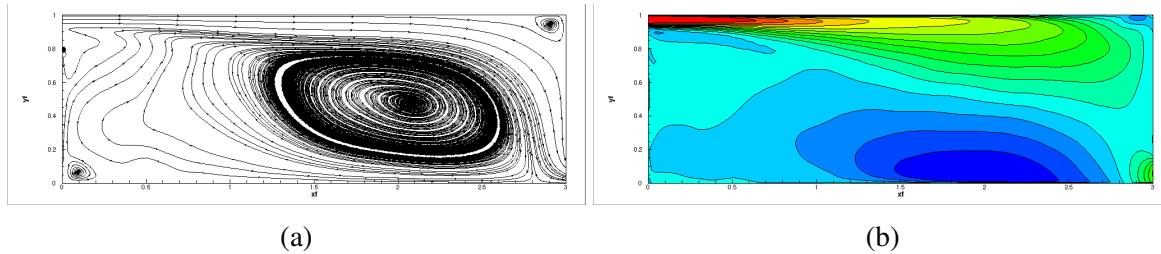


FIGURE 4.3 – Moments statistiques d'ordre 1 : (a) lignes de courant (b) composante de vitesse horizontale (M. S. BINOUS et al., 2016).

recirculation principale induite par le développement du jet de paroi (cf. Fig. 4.3). Les comparaisons avec les résultats expérimentaux de NIELSEN et al. (1978) sont présentées sur les figures 4.4 et 4.5. Plus précisément, les profils de la vitesse longitudinale moyenne et son moment d'ordre 2 sont représentés à plusieurs positions en $x/H = 1$ et 2 , sur le plan de symétrie $Z = 0$ et en $Z/W = 0.4$. Ces profils indiquent un accord satisfaisant entre les simulations numériques et les données expérimentales. On observe le développement du jet de paroi sur la partie supérieure de la cavité, avec toutefois un écart significatif pour la figure 4.5b. Cet écart est probablement associé à la présence de la paroi latérale. Des écarts sont également à noter pour les grandeurs rms , notamment en $x/H = 1$, résultant probablement du profil de vitesse en sortie de buse. Ces observations recoupent celles de NIELSEN et al. (1978) qui rendent compte d'un profil en sortie de buse instationnaire, mais sans être pleinement turbulent. Les résultats présentés figures 4.4 et 4.5 ne permettent pas de discriminer la simulation LES de celles sans modèle (DNS). Cette remarque traduit le fait qu'une simulation sous-résolue sans modèle tendrait à se comporter comme une LES (modélisation LES implicite). Ce point nécessiterait cependant des investigations supplémentaires en réalisant des simulations avec des résolutions plus fines.

Conclusions. Cette première série de simulations a permis de montrer le potentiel de l'algorithme de diagonalisation parallèle et du solveur tridiagonal approché rPDD pour l'évaluation des schémas compacts. Des simulations numériques ont pu être conduites sur une configuration complexe malgré la simplicité de la géométrie. Ces premiers résultats nécessiteraient d'être confortés par des simulations

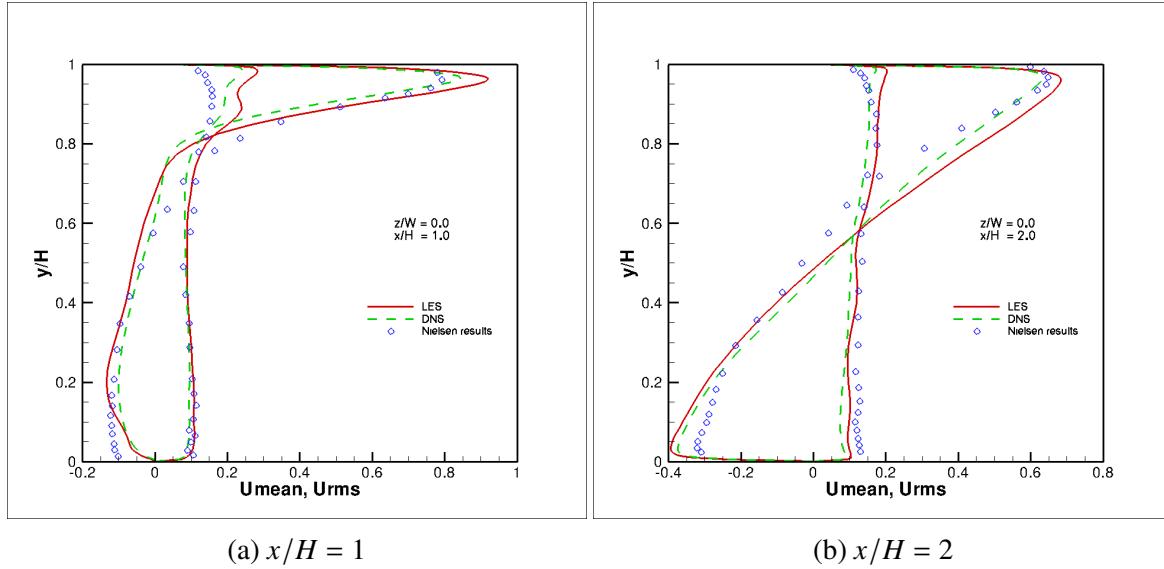


FIGURE 4.4 – Profils de vitesse extraits du plan de symétrie $z/W = 0$.

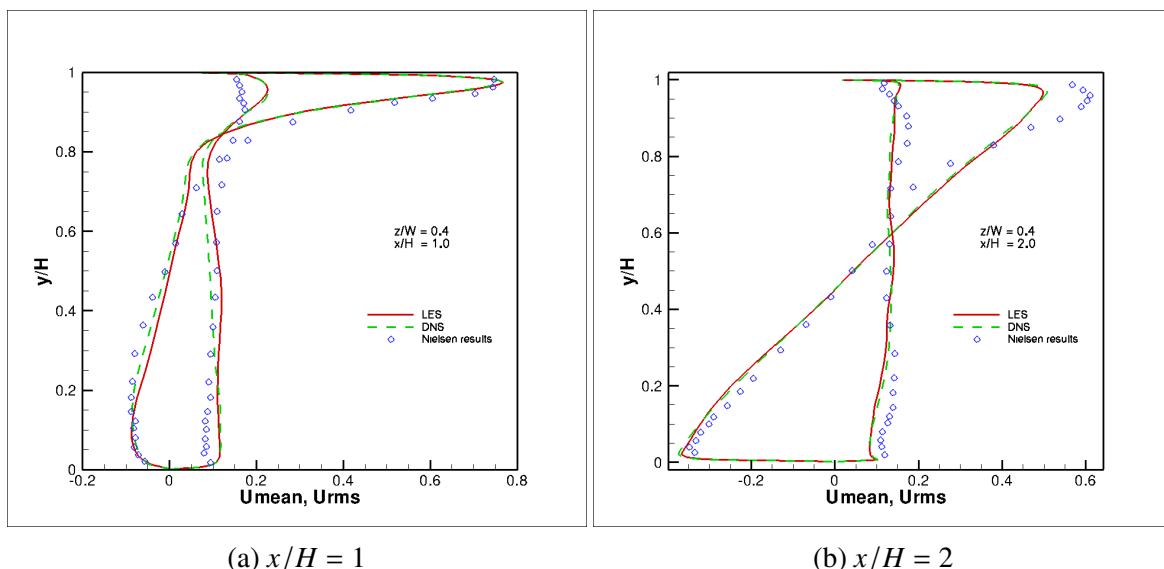


FIGURE 4.5 – Profils de vitesse extraits du plan $z/W = 0.4$ proche paroi latérale.

avec des résolutions accrues. Toutefois, le peu de résultats expérimentaux ainsi que le manque de références disponibles, soulèvent la pertinence de procéder à de telles simulations.

4.1.2 Cavité à grand rapport de forme vertical

Contexte et motivations. De nombreuses études portent sur l'évaporation d'eau dans des canaux à des fins de désalinisation (HAMMOU et al., 2004; JANG et al., 2005; TERZI et al., 2016). Le principe consiste à maintenir le ruissellement d'un film liquide sur les parois d'un canal avec des conditions anisothermes. Il émerge de la littérature une modélisation récurrente basée sur un écoulement binaire air/vapeur d'eau dans un canal en régime laminaire. L'objectif de ces travaux concerne la prévision de la concentration en vapeur d'eau avec un modèle d'évaporation pariétale. Dans le cadre de la thèse de H. Doukkali, nous avons constaté que peu d'études abordent cette problématique en écoulement turbulent. Or, dans le cas des récepteurs solaires plans et fermés, les conditions de fonctionnement soulèvent l'existence d'un régime de transition vers la turbulence. Ainsi, pour accompagner H. Doukkali dans cette problématique de désalinisation, nous avons réalisé des simulations de convection naturelle dans une cavité allongée avec un long rapport de forme et inclinée. D'un point de vue méthodologique l'apport a consisté à l'implémentation de la discréttisation pseudo-spectrale dans la direction périodique. Ce travail peut être interprété comme une extension de celui de M. Binous. Les principaux éléments de ce travail sont récapitulés ci-après pour illustration.

Configuration géométrique et hypothèses. Le modèle considéré dans cette étude repose sur une représentation simplifiée d'un distillateur solaire. Il s'inspire de travaux expérimentaux disponibles (BETTS et al., 2000; COOPER et al., 2012; VERSTEEGH et al., 1998). La géométrie est présentée sur

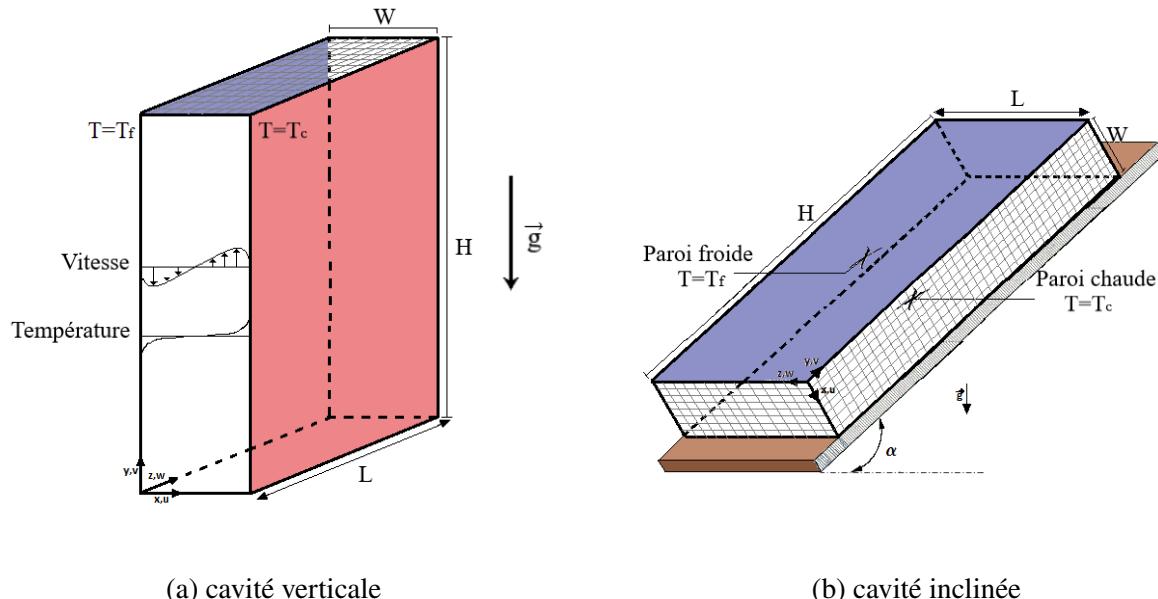


FIGURE 4.6 – Configuration géométrique de la cavité différentiellement chauffée et inclinée.

la figure 4.6. Il s'agit d'une cavité de rapport de forme 1 : 8 avec une distance entre les parois de $W = 0.0762 \text{ m}$ et pour la direction homogène de longueur $L = 0.52 \text{ m}$. Les parois latérales sont différentiellement chauffées avec une différence de température $\Delta T = T_c - T_f$, qui génère un mouvement de l'air dans la cavité. Les différences de température étant relativement faibles, les variations de la masse volumique sont considérées seulement lors de l'évaluation des forces de flottabilité. Dans ces conditions, l'adimensionnalisation des équations introduit le nombre de Rayleigh défini par $Ra = g\beta\Delta TW^3/\nu^2$. Celui-ci est fixé à 8.6×10^5 pour l'étude de l'influence de l'angle

d'inclinaison θ qui est compris entre 15° et 90° . Pratiquement, ce choix correspond à une différence de l'ordre de 20° observable avec les capteurs plans et permet aussi des comparaisons avec des expérimentations ou simulations existantes.

Eléments de validation. Dans un premier temps, la bonne implémentation de la discréétisation pseudo-spectrale pour la direction transversale et du modèle LES WALE a été vérifiée en simulant l'écoulement de convection naturelle en canal bi-périodique. Le nombre de Rayleigh prescrit à 5.4×10^5 a été retenu afin de permettre des comparaisons avec les résultats numériques de (PALLARES et al., 2010; VERSTEEGH et al., 1998). Les comparaisons des moments statistiques illustrées sur la figure 4.7 montrent un bon accord avec les résultats de référence. Un léger écart est observé sur la grandeur

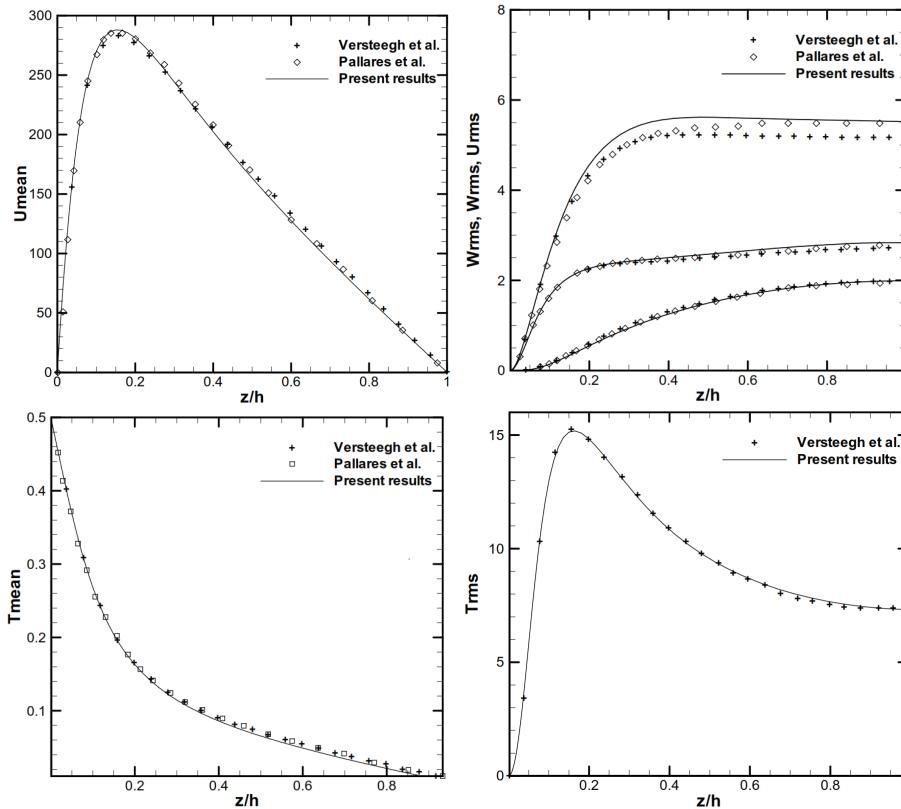


FIGURE 4.7 – Grandeur statistiques dans un canal bi-périodique différentiellement chauffé.

fluctuante de la composante verticale de vitesse. L'amplitude de l'écart est du même ordre de grandeur que celle reportée dans les résultats de la littérature (PALLARES et al., 2010; VERSTEEGH et al., 1998).

Sélection de résultats. Un premier travail (DOUKKALI et al., 2018) d'estimation de la résolution de maillage basé sur les travaux de DOUKKALI et al. (2018), NG et al. (2013) et permettant une correcte résolution de la sous-couche visqueuse nous a conduit à considérer une résolution de $64 \times 150 \times 64$ points de discréétisation avec un modèle LES. Nous nous sommes également appuyés sur des comparaisons dans le cas d'une cavité allongée verticale afin de "situer" nos résultats par rapport à la littérature (BETTS et al., 2000; Z. ZHANG et al., 2007). La figure (4.8) présente les profils de la composante de vitesse moyenne verticale et sa valeur rms, ainsi que le profil de température moyen. Les résultats de la littérature (BETTS et al., 2000; Z. ZHANG et al., 2007) sont aussi reportés sur la figure (4.8). On notera le bon accord général entre l'expérimentation et la présente simulation. Le développement des couches limites ascendante et descendante est correctement décrit, ainsi que la stratification.

La figure (4.9) présente les iso-contours de la température et les lignes de courant pour différents angles d'inclinaison. Ces champs moyens montrent la modification de la topologie de l'écoulement

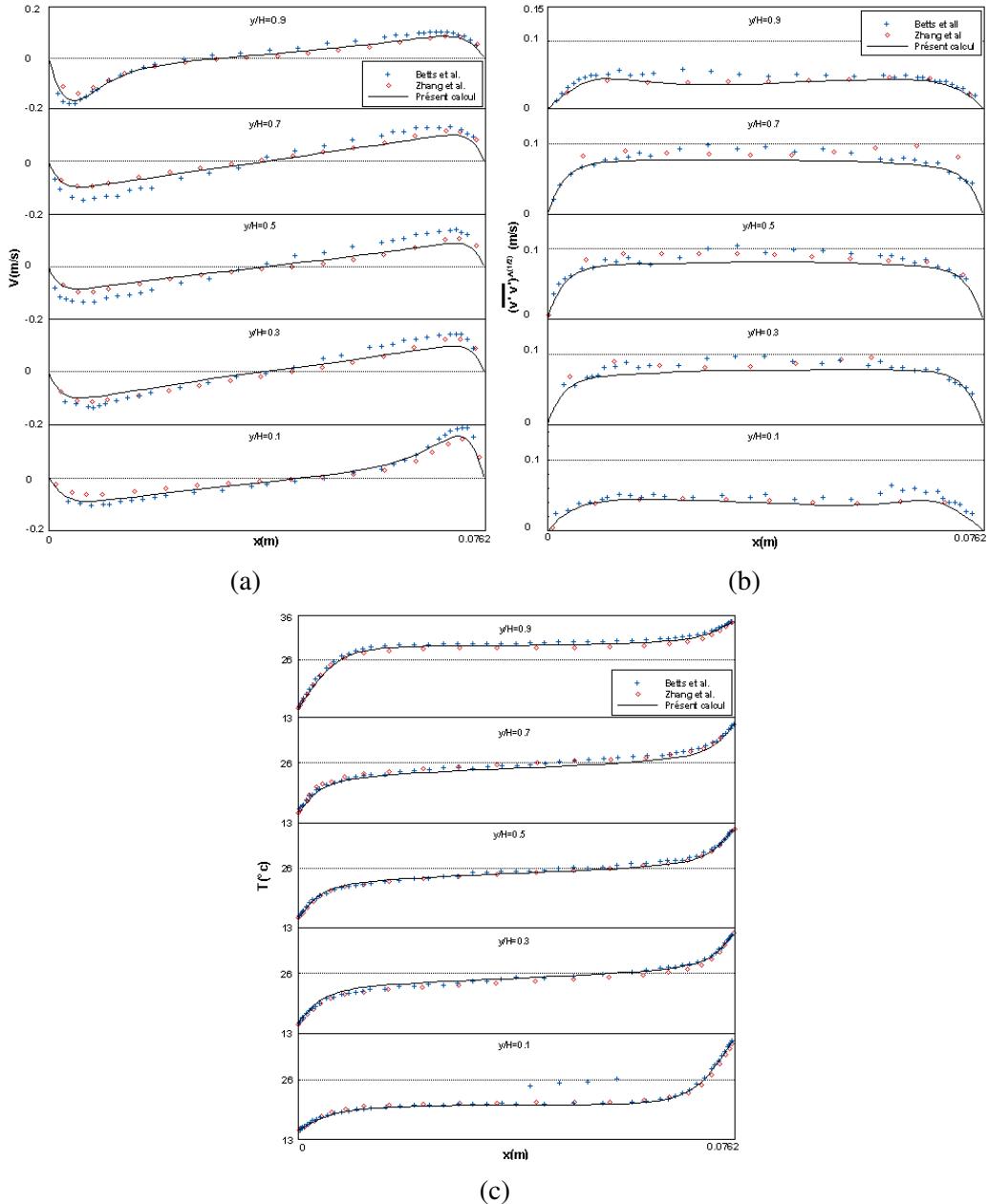


FIGURE 4.8 – Moments statistiques d’ordre 1 et 2 : (a) et (c) composante verticale de vitesse (b) température (DOUKKALI et al., 2018).

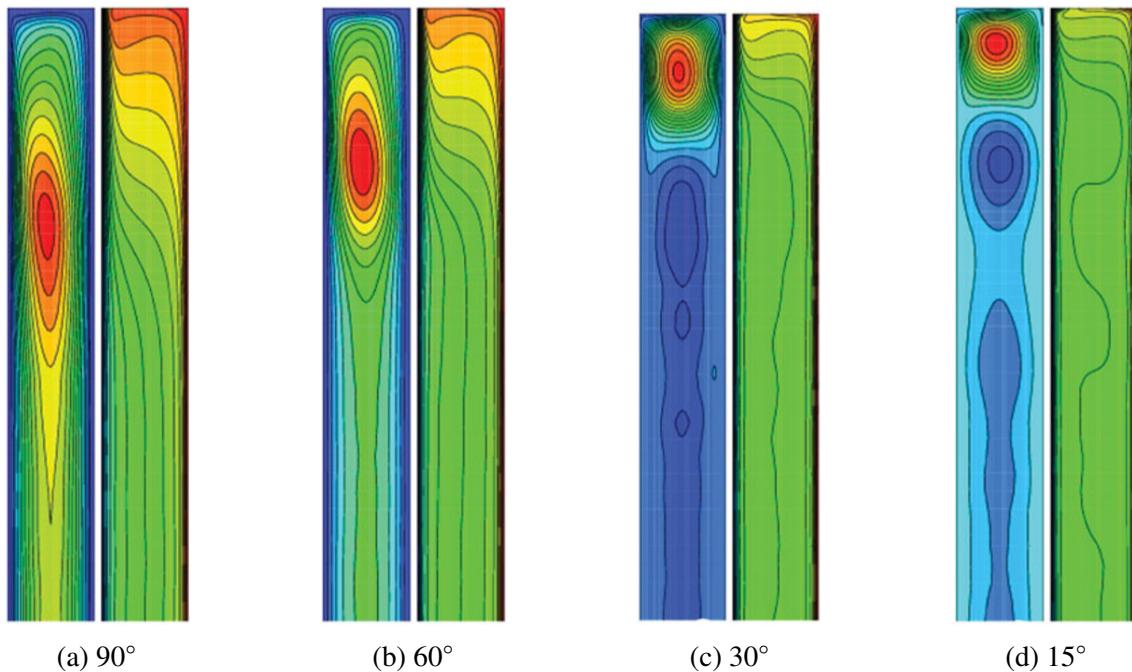


FIGURE 4.9 – Champs moyens des lignes de courant et de la température en fonction de l'inclinaison (DOUKKALI et al., 2018).

avec l'inclinaison. Aux faibles inclinaisons, les isovaleurs de la température dans le coeur de la cavité indiquent l'apparition de cellules rotatives. Aussi pour un angle de 15 degrés, la configuration se rapproche de celle d'un écoulement de type Rayleigh Bénard. Ces quelques éléments d'analyse de l'écoulement tendent à montrer que l'hypothèse consistant à considérer l'écoulement comme laminaire dans un dispositif de désalinisation peut être sujet à discussion.

Perspectives. L'évolution naturelle de ce travail est la prise en compte de l'évaporation ou de la condensation sur les parois. La conservation de la masse nous conduit à considérer un modèle alternatif comme celui à faible nombre de Mach pour modéliser les effets de compressibilité. A ma connaissance, il n'existe pas de travaux en enceinte fermée 3D double diffusif avec évaporation. En dimension 2, Guy Lautia a développé des études complètes incluant la modélisation mathématique, schémas numériques et applications à la condensation/évaporation en cavité carrée. Dans le cadre du co-encadrement de la thèse O. Chabani, nous avons obtenu quelques résultats de validation pour une cavité différentiellement chauffée (CHABANI et al., 2015). La méthodologie que je propose (Chap. 2) me permettrait d'étendre la présente étude des écoulements turbulents confinée avec évaporation.

4.2 Instabilités strato-rotationnelles

Les résultats présentés dans cette section sont le fruit d'un travail de collaboration réalisé par G. Meletti dans le cadre d'une thèse en co-tutelle BTU/Aix-Marseille Université. Je reporte ci-après le contexte ainsi qu'une sélection de résultats significatifs permettant d'illustrer la capacité de la méthodologie développée dans un cadre dit de production. En l'occurrence, en s'appuyant sur un dispositif expérimental développé par U. Harlander à Cottbus (BTU, Allemagne), il s'agit ici de reproduire des phénomènes liés aux instabilités observées dans ce type d'écoulements de Taylor-Couette stratifiés.

4.2.1 Contexte et motivations

L'instabilité strato-rotationnelle (notée SRI par la suite) est associée aux milieux stratifiés. Elle peut apparaître dans les écoulements de Couette plans en rotation et stratifiés verticalement et stables vis-à-vis de la rotation (cf. fig. 4.10). Elle est aussi associée aux mécanismes participant à la formation des disques d'accrétion en agissant sur le moment angulaire de la matière en rotation (DUBRULLE et al., 2005). Cette instabilité hydrodynamique a été observée à l'aide de la simulation numérique dans une configuration de type Couette-Taylor par SHALYBKOV et al. (2005). Par ailleurs, LE BARS et al. (2007) ont étudié expérimentalement sur une configuration de type Taylor-Couette le développement de la SRI. L'étude de cette instabilité reste un sujet d'actualité car les mécanismes relevant de sa génération ainsi que des instabilités secondaires restent mal comprises. Il s'agissait de l'objectif principal du travail de thèse de G. Meletti : contribuer à l'analyse de stabilité en combinant expérimentation et simulation numérique. La complémentarité des approches expérimentale et numérique de ce travail est un point fort, car il a permis de conforter les capacités prédictives pour de tels phénomènes instationnaires mettant en jeu des échelles temporelles très différentes (modulation).

4.2.2 Modèle physique et configuration

La présente étude de la SRI est basée sur un écoulement de Couette-Taylor soumis un gradient de température vertical positif. La figure 4.10 présente la configuration expérimentale utilisée par G. Meletti ainsi qu'un schéma descriptif avec les notations utilisées. Le fluide retenu est une huile

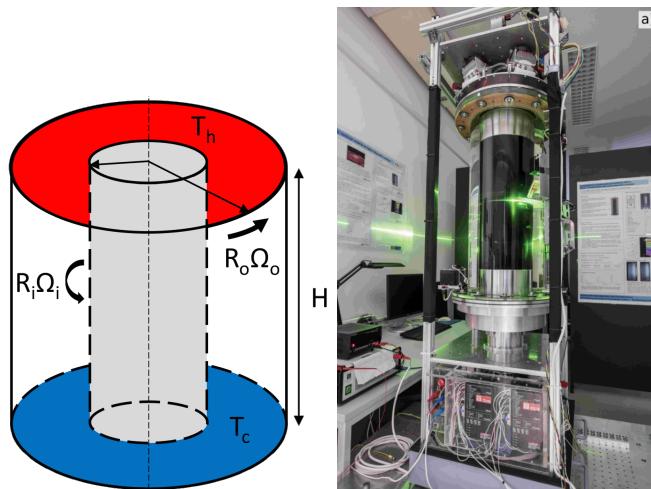


FIGURE 4.10 – Configuration géométrique et banc expérimental (BTU).

synthétique dont les propriétés sont détaillées dans le tableau 4.1. L'écoulement est considéré comme

rayon intérieur	r_{in}	75 mm	viscosité cinématique	ν	$5 \times 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$
rayon extérieur	r_{out}	145 mm	densité	ρ	923 kg m^{-3}
entrefer	d	70 mm		α	$1.04 \times 10^{-3} \text{ K}^{-1}$
hauteur	H	700 mm	conductivité thermique	k	$0.133 \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-1}$
rapport de forme	Γ	10	chaleur spécifique	c_p	$1630 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$
ratio des rayons	η	≈ 0.52	nombre de Prandlt	Pr	≈ 57

TABLE 4.1 – Paramètres géométriques de la cavité et propriétés thermophysiques.

étant incompressible et les forces de flottabilité sont modélisées à l'aide de l'hypothèse de Boussinesq.

Les parois verticales sont en rotation différentielle caractérisée par leurs vitesses angulaires Ω_{in} et Ω_{out} . Le gradient de température est imposé par des conditions aux limites de type Dirichlet sur les parties inférieure et supérieure de la géométrie annulaire. Le diagramme de stabilité marginale est fonction de trois nombres adimensionnés. Le premier est un nombre de Reynolds basé sur la fréquence de Brunt-Väisälä :

$$Rn = \frac{Nr_i(r_o - r_i)}{\nu}, \quad \text{avec } N = \sqrt{\alpha g \frac{\partial T}{\partial z}}$$

Le second est un nombre de Reynolds basé sur la vitesse rotation de la paroi interne :

$$Re = \frac{\Omega_i r_i (r_o - r_i)}{\nu}$$

Enfin, le dernier paramètre caractérise le différentiel de vitesse angulaire de rotation des parois interne et externe $\mu = \Omega_o/\Omega_i$. Dans cette étude de l'instabilité SRI, les équations de Navier-Stokes incompressibles en coordonnées cylindriques sont en conséquence discrétisées selon les techniques développées au chapitre 3.

4.2.3 Simulation de l'instabilité SRI

La figure 4.11 présente le diagramme de stabilité marginale correspondant aux expérimentations réalisées par la G. Meletti. Les points de mesures correspondent à une gamme du nombre de Reynolds couvrant l'intervalle $200 < Re < 1300$ avec un ratio $\mu = 0.35$ et un différentiel de température de $\Delta T = 4K$ ($Rn = 250$). L'objectif des simulations était de confirmer ce diagramme de stabilité, puis

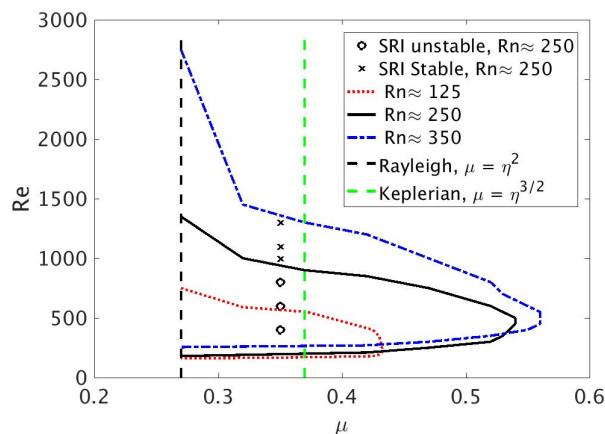


FIGURE 4.11 – Diagramme de stabilité marginale.

d'extraire certaines propriétés. L'une des principales difficultés de la simulation de l'instabilité SRI dans la gamme étudiée ne réside pas dans la résolution spatiale mais dans les temps d'intégration nécessaires au développement complet de cette instabilité. Ce point est illustré ci-après.

Comparaisons simulation/expérimentation. Les composantes de vitesse radiale et azimutale sont collectées par PIV et extraites des simulations sur un plan $r - \phi$ à mi-hauteur et à mi-rayon. La figure 4.12 présente le diagramme de Hövmoller de la composante azimutale de vitesse issue de l'expérience et de la simulation. Elle illustre le caractère multi-échelle temporelle de cette instabilité. Des profils radiaux de la vitesse azimutale moyenne et de spectres temporels sont également présentés figure 4.13. Ces éléments de validation indiquent un bon accord entre les expérimentations et la simulation tant sur les grandeurs moyennes que sur les composantes harmoniques. Le diagramme de stabilité marginale (cf. Fig. 4.13) a été déterminé par simulations pour les nombres de Reynolds $200 < Re < 1000$, confortant ainsi l'adéquation entre expérimentation et simulation. Par ailleurs,

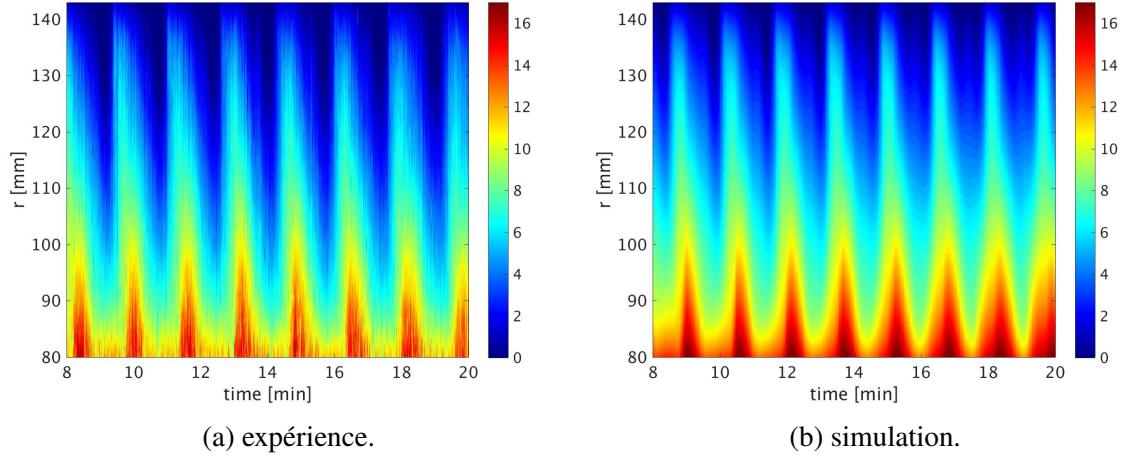


FIGURE 4.12 – Diagramme de Hövmoller de la composante azimutale de vitesse u_φ pour $Re = 400$.

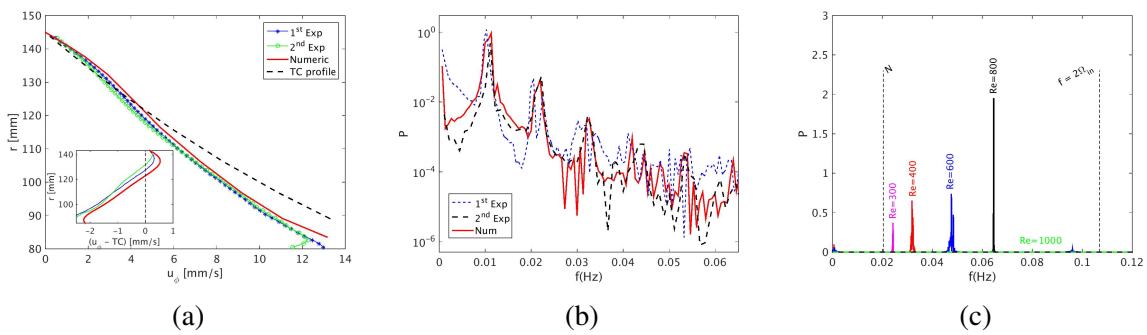


FIGURE 4.13 – Étude de stabilité pour une gamme de paramètres $200 < Re < 1000$ avec $\Delta T = 4K$ et $\mu = 0.35$, (a) profils de vitesse moyen $RE=400$, (b) spectres $RE=400$, (b) spectres de la composante azimutale (c) spectres avec variation du Reynolds $200 < Re < 1000$.

comme observé expérimentalement, une transition vers la stabilité est observée pour des nombres de Reynolds compris entre $Re = 800$ et $Re = 1000$.

Modulation d'amplitude. Le calcul haute performance a rendu possible de caractériser l'instabilité SRI sur des temps d'intégration longs. Cela a mis en évidence un phénomène de modulation d'amplitude basse fréquence. La figure 4.16 présente la manifestation de cette modulation d'amplitude à partir des composantes azimutale et radiale de vitesse collectées à mi-hauteur et à mi-rayon. On distingue

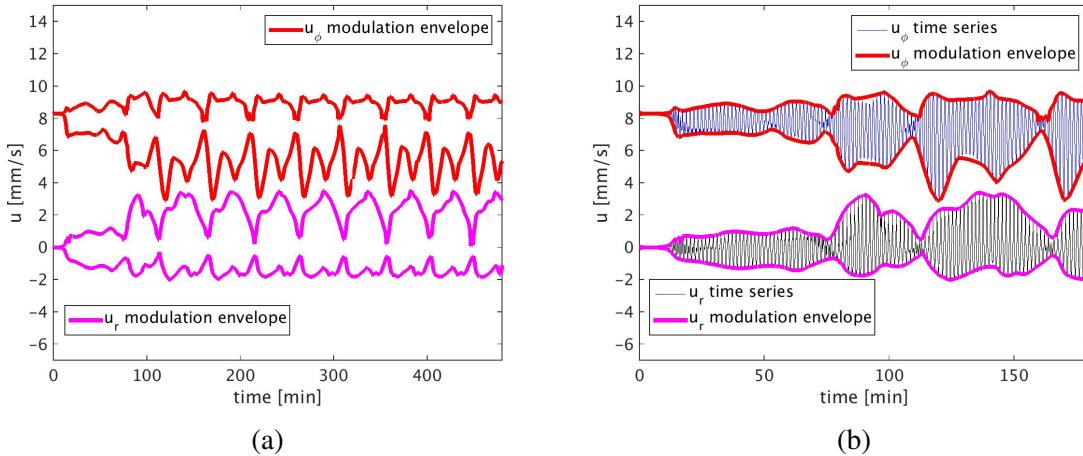


FIGURE 4.14 – Modulation d'amplitude $Re = 600$ avec $\Delta T = 4K$ et $\mu = 0.35$, (a) établissement de la modulation (b) zoom.

clairement un phénomène basse fréquence qui s'établit sur les temps longs de l'ordre de l'heure. Les investigations menées par G. Meletti montrent que ces modulations caractérisent des régimes différents de l'instabilité SRI. Cette dernière se manifeste sous la forme d'une structure en spirale en rotation autour de l'axe principal avec un sens de rotation variable dans le temps. L'analyse des simu-

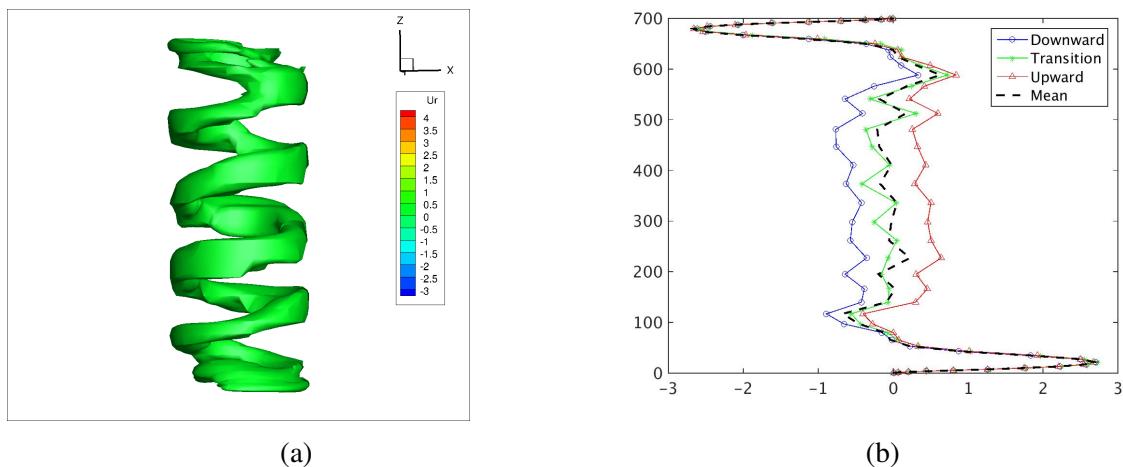


FIGURE 4.15 – L'instabilité SRI (a) Iso-surface de la composante radiale de vitesse, (b) moyenne conditionnelle.

lations montre que la modulation d'amplitude présente deux régimes distincts que l'on peut nommer horaire ou anti-horaire. La figure 4.16 présente les diagrammes de Hovmöller entre deux modulations d'amplitude. Les diagrammes de Hovmöller 4.16b-d indiquent des sens opposés de propagation des structures que l'on associe au sens de rotation horaire et anti-horaire. Le minimum du signal modulé correspond alors à la transition entre les rotations horaire et anti-horaire pour laquelle on observe une superposition des deux caractéristiques linéaires.

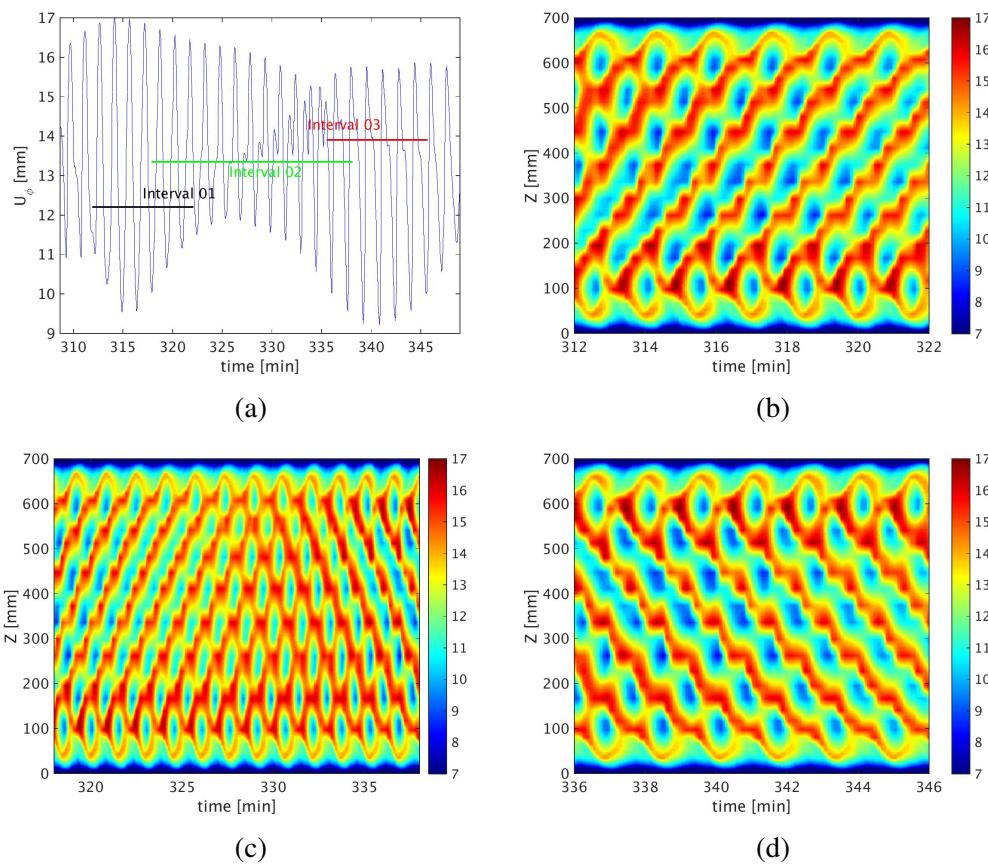


FIGURE 4.16 – L'instabilité SRI, (a) composante azimuthale de vitesse au cours du temps, (b) (c) et (d) diagrammes de Hovmöller sur les intervalles 1 2 et 3.

Conclusions. Cette étude de l'instabilité SRI illustre la complémentarité de l'expérimentation et de la simulation numérique. La combinaison HPC et ordre élevé nous a permis d'intégrer sur des durées suffisamment longues pour observer ce phénomène de modulation d'amplitude, récemment observé par LOPEZ et al. (2022). Enfin, du point de vue de la formation par la recherche, ce travail illustre la relative simplicité de mise en œuvre du code *HOCs³* par un étudiant avec un profil expérimentateur.

4.3 L'instabilité barocline en grande cavité

L'association de la simulation numérique et de l'expérimentation pour l'étude de l'instabilité strato-rotationnelle SRI illustre la complémentarité de ces deux approches. Dans cette dynamique, nous avons naturellement souhaité prolonger cette démarche concernant l'étude de l'instabilité barocline dans une configuration d'écoulement en rotation avec stratification résultant d'une différence de température radiale. L'objectif final de ces travaux est la paramétrisation des ondes d'inertie-gravité qui pourrait apparaître dans les écoulements baroclines. La difficulté supplémentaire en comparaison à l'étude de l'instabilité SRI réside dans la nécessité d'employer des maillages très fins sur des temps d'intégration longs afin de pouvoir capturer la dynamique riche de cet écoulement. En s'appuyant sur des résultats préliminaires, un résumé de ce travail sur les aspects baroclines est proposé dans les paragraphes suivants.

4.3.1 Contexte et motivations

Les ondes baroclines sont reconnues pour être un des phénomènes énergétiques dominant dans les circulations atmosphériques à grande échelle (PIERREHUMBERT et al., 1995). Il est possible de

reproduire en laboratoire leur dynamique à l'aide d'un dispositif relativement simple (HIDE, 1967) : c'est la cavité dite barocline. Il s'agit d'une cavité annulaire contenant un fluide stratifié et en rotation solide (cf. Fig. 4.17). Les paramètres de contrôle classiques sont les nombres sans dimension de

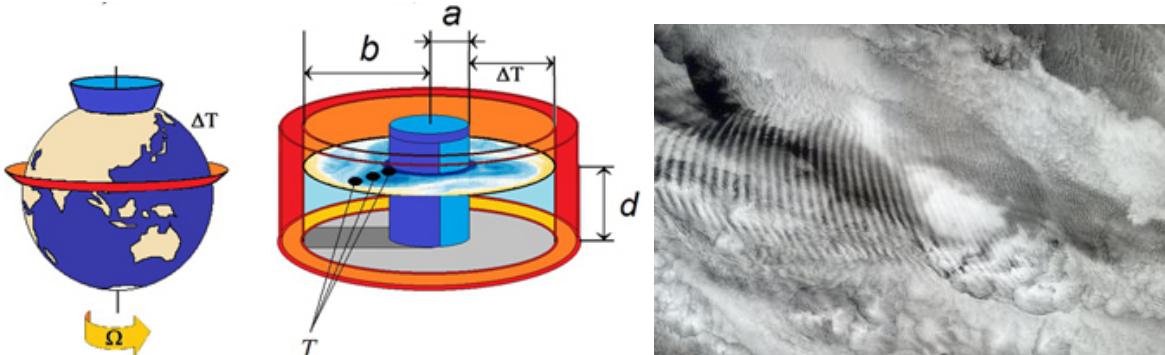


FIGURE 4.17 – Instabilités baroclines et ondes inertie-gravité (a) modèle de la cavité barocline (RODDA, 2019) (b) manifestation d'OIG dans l'atmosphère.

Taylor Ta et de Rossby Ro qui sont associés respectivement à la rotation de la cavité et à l'intensité de la stratification verticale. Pour une configuration géométrique donnée, et selon les paramètres de contrôle, l'écoulement présente différents régimes allant de solutions axisymétriques jusqu'à un régime de turbulence géostrophique en passant par le développement d'ondes régulières stationnaires et à vacillation structurelle.

Les ondes d'inertie-gravité (OIG) joueraient un rôle important en favorisant les transferts d'énergie et de quantité de mouvement dans l'atmosphère et les océans. Le mécanisme d'émission des OIG est lié à la capacité à restaurer de l'énergie des forces de flottabilité et de Coriolis, respectivement caractérisées par la fréquence de Brunt-Väisälä N et la fréquence inertielle f . Cela se traduit par l'émission d'ondes d'inertie qui se propage dans l'atmosphère comme l'illustre la figure 4.17. Parmi les mécanismes d'émission des OIG, l'émission dite spontanée, résultant de l'excitation par les jets et fronts d'ondes baroclines joue un rôle dans le transport de la quantité de mouvement et d'énergie aux petites échelles **Plougonven2014a**. En l'état des connaissances actuelles, il apparaît que l'émission des OIG est effective le long de la paroi intérieure pour des cavités à grand rapport de forme. Or, très récemment Achatz Harlander privilégient des cavités baroclines avec un faible rapport de forme $b - a \gg d$, pour favoriser l'émission spontanée des OIG et modéliser plus fidèlement la dynamique atmosphérique (où $N/f \gg 1$) e Le lecteur peut se référer aux articles (ACHATZ et al., 2015 ; RODDA et al., 2020) permettant d'accroître le ratio N/f . Pour ce type de cavité dénommée "atmospheric-like", les observations préliminaires semblent indiquer une émission spontanée d'OIG dans des plans horizontaux à la fois dans les expérimentations et les simulations numériques. A notre connaissance, hormis l'article de HIEN et al. (2018), il n'existe pas de simulation reproduisant l'émission spontanée d'OIG dans une cavité barocline de grand rapport de forme. L'inconvénient pour ce type de cavité est sa surface d'échange qui semble être suffisamment grande et qui par conséquent accroît les transferts avec le milieu environnant. Ceci constitue le cœur du projet PHC-PROCOPE (BTU/M2P2/LAMPS) pour lequel nous combinons expérimentations et simulations numériques directes sur une cavité barocline de grande taille afin d'étudier la sensibilité de l'écoulement aux transferts à la surface libre. Ce travail est toujours en cours, je présente donc quelques résultats illustrant notre démarche et les résolutions les plus fines atteignables avec les méthodologies présentées dans le chapitre 3.

4.3.2 Modèle mathématique et configuration géométrique

Configuration de la cavité barocline. Le banc expérimental réalisé à BTU-Cottbus est constitué de deux cylindres concentriques avec un grand rapport de forme $(r_o - r_i)/H = 5.8$. La cavité barocline

est remplie d'eau de viscosité constante ν , définissant ainsi une surface libre avec l'environnement ambiant. Une différence de température radiale est imposée entre les deux parois verticales de la cavité qui est soumise à une rotation d'ensemble à la vitesse angulaire Ω . Les paramètres sont récapitulés dans le tableau 4.2. Les faibles variations de température légitiment l'hypothèse de Boussinesq pour

Paramètres géométriques			Propriétés thermophysiques		
Rayon intérieur	a (mm)	350	Densité	$\rho (kg\ m^{-3})$	998.21
Rayon extérieur	b (mm)	700	Viscosité cinématique	$\nu (m^2\ s^{-1})$	1.005×10^{-6}
Espacement	b-a (mm)	350	Conductivité thermique	$\kappa (m^2\ s^{-1})$	0.1434×10^{-6}
Hauteur	H(mm)	60	Coefficient d'expansion	$\alpha (K^{-1})$	0.207×10^{-3}

TABLE 4.2 – Configuration géométrique de la cavité barocline de Cottbus.

modéliser les effets de la flottabilité. L'écoulement est alors gouverné par les équations de Navier-Stokes incompressibles. Les équations sont formulées dans un repère cylindrique en rotation suivant la verticale avec une vitesse Ω (ABIDE et al., 2018).

Quel modèle de surface libre ? La série d'expérimentations menée par l'équipe de U. Harlander semble soulever une sensibilité des résultats du fait de la présence de la surface libre. En effet, la surface libre présente une surface de contact avec le milieu ambiant important. Elle peut être le siège de phénomènes de transferts thermiques comme l'évaporation ou des transferts convectifs. De même un modèle pour la surface libre de type condition limite *free stress* peut s'avérer non approprié. Par exemple (FAUGARET et al., 2020) montre l'influence de la condition limite sur le déclenchement des instabilités. En première approche, nous avons considéré un modèle qui perturbe la condition d'adiabaticité de la surface libre. Le modèle des transferts thermiques à la surface libre est alors donné par :

$$-\lambda \partial_{\mathbf{n}} T = h(T - T_{amb}) \quad (4.1)$$

le coefficient d'échange $h = 5Wm^{-2}K^{-1}$ et T_{amb} est la température ambiante de la pièce. Un deuxième modèle est actuellement en considération, il s'agit du modèle dit de *Marangoni*. Pour ce modèle, on modélise l'impact du gradient de température à la surface libre sur la tension superficielle de l'eau. L'équilibre des forces de viscosité à la surface, se traduit par les conditions aux limites suivantes.

$$\mu \partial_n \mathbf{u}_s = -\sigma_T \nabla_s T \quad (4.2)$$

$-\sigma_T$ est la dérivée de la tension superficielle par rapport à la température, et $\nabla_s T = \nabla T - \nabla T \cdot \mathbf{n}$ et $\mathbf{u}_s = \mathbf{u} - \mathbf{n} \sigma_T \nabla_s T$ sont les composantes tangentielles de la tension superficielle de l'eau. Dans les premiers temps nous avons réalisé une étude préliminaire de l'influence de ces modèles sur la surface libre.

4.3.3 Quelques simulations de la cavité barocline

Une simulation type. L'ensemble des simulations présenté ci-après a été obtenu selon la méthodologie suivante. Une solution stationnaire axisymétrique est premièrement calculée sur un maillage grossier pour initier la transition vers un régime d'écoulement. La figure 4.18 illustre cette procédure avec la perturbation de la solution stationnaire obtenu $\Omega = 0.2\ rpm$ afin d'atteindre un régime d'ondes stationnaires pour la différence de température de $\Delta T = 2.5\ K$ et un taux de rotation de $\Omega = 0.4\ rpm$. La figure 4.18a est un diagramme dit de Hövmoller qui représente la température de surface à mi-rayon de la cavité en fonction du temps. On constate que le régime d'ondes stationnaires est installé après un temps d'intégration de 4 heures soit environ 18000 pas de temps. La figure 4.18b montre le développement de l'onde barocline à différents instants. On remarque la transition vers un mode 4 matérialisé par les 4 structures en déplacement prograde.

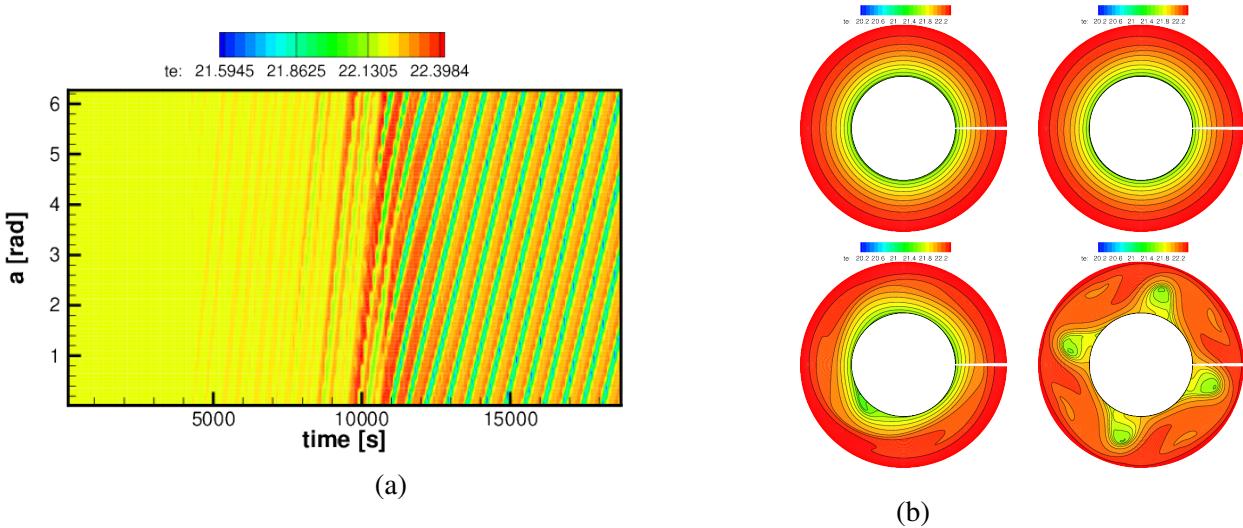


FIGURE 4.18 – Cavité barocline $\Omega = 0.4 \text{ rpm}$ $\Delta T = 2.5 \text{ K}$ température de surface (a) diagramme de Hövmoller (b) instantanées de la température à différents instants.

Détermination du régime. Le régime de l'écoulement barocline est fonction de la vitesse de rotation et de la différence de température verticale. Les régimes se différencient par le nombre et la structure de l'onde barocline (cf. Fig. 4.18). Une information quantitative s'obtient avec une analyse harmonique qui spécifie le nombre de modes et la vitesse de phase. Une telle analyse est présentée figure 4.19 illustrant l'occurrence d'une onde régulière d'un mode 5. Le *drift* s'estime alors à partir de la pente de ϕ_m/m

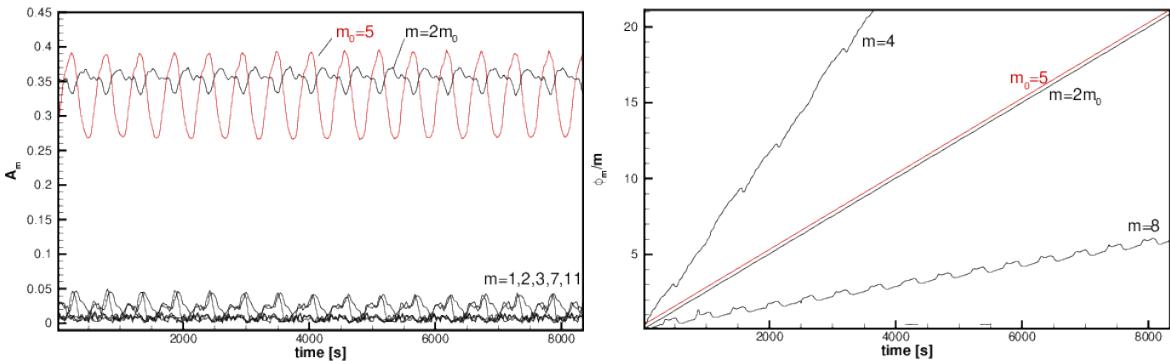


FIGURE 4.19 – Analyse harmonique pour le cas $\Omega = 0.5 \text{ rpm}$ $\Delta T = 5 \text{ K}$ (gauche) amplitude A_m du mode m (droite) phase divisée par le mode ϕ_m/m

soit pour cette configuration $2.29 \times 10^{-3} \text{ rad s}^{-1}$. Cette vitesse s'interprète comme la vitesse angulaire prograde des ondes baroclines. Un paramètre supplémentaire est nécessaire pour caractériser le régime de l'écoulement barocline : il s'agit du gradient thermique moyen dans la cavité. HIDE (1967) souligne que fréquence de N est à définir sur une différence de température verticale qui est à priori inconnue : la grandeur disponible est la différence de température horizontale $\Delta T = T_b - T_a$. On détermine alors la différence de température verticale caractéristique à partir du champ de température moyen (cf. Fig. 4.21). Plus exactement, on définit deux paramètres adimensionnels σ_r et σ_z qui caractérisent le gradient moyen :

$$\sigma_r \frac{\Delta T}{b-a} = \frac{1}{(b-a)H} \int_0^h \int_a^b \frac{\partial T}{\partial r} r dr dz \quad \sigma_z \frac{\Delta T}{H} = \frac{1}{(b-a)H} \int_0^h \int_a^b \frac{\partial T}{\partial z} r dr dz \quad (4.3)$$

Ainsi, on évalue la différence de température verticale effective par $\Delta T_v = \sigma_z \Delta T$ permettant le calcul du nombre de Burger (O'NEIL, 1969).

Influence du modèle de la frontière libre. En introduction de cette section, il a été mentionné que les expérimentations montrent une sensibilité de la dynamique aux conditions expérimentales. Nous avons alors testé trois modèles de la surface libre pour estimer le rôle ces derniers sur la dynamique de l'écoulement. Les simulations présentées reproduisent les expérimentations rapportées dans (RODDA et al., 2020). La vitesse de rotation est de 0.7 rpm la différence de température de 2.5 K avec une température de paroi intérieure de 23°C. Les conditions aux limites à la surface libres sont variées selon les trois modèles développés lors de la section précédente. La figure 4.20 présente des instantanées des champs de température de la surface libre. Ces simulations ont une résolution

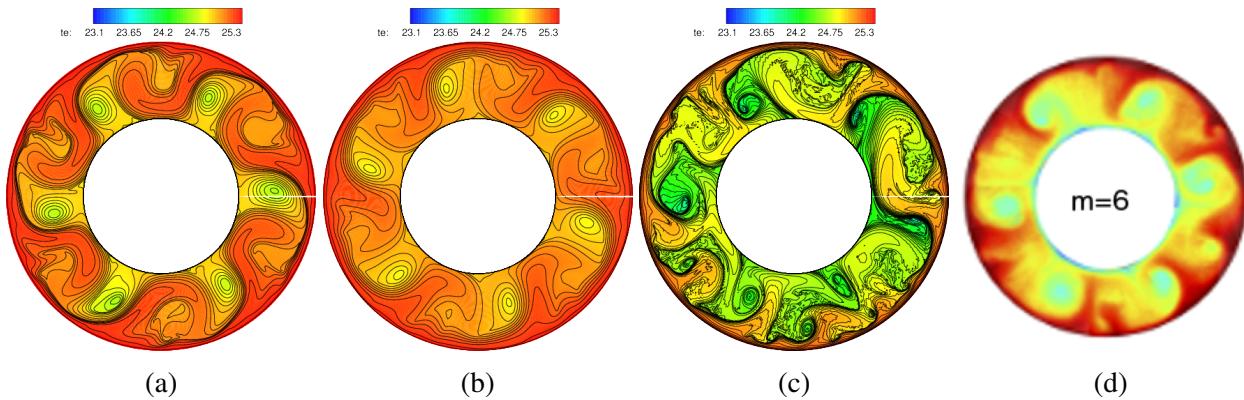


FIGURE 4.20 – Champs de température de la surface libre (a) glissement sans frottement, adiabatique (b) Marangoni, adiabatique (c) glissement sans frottement, convectif (d) expérimentation.

$1024 \times 200 \times 400$ et nécessitent des temps d'intégration pour la production de l'ordre 5 heures, soit un peu moins de 200000 pas de temps. Ces simulations ont nécessité 72 heures cpu sur 800 coeurs. D'un point de vue qualitatif la condition aux limites convectives présente le plus de similitudes avec les expérimentations.

La stratification thermique donne une indication quantitative pour aider à l'identification du régime. La figure 4.21 présente les champs de la température moyennée. On observe une stratification verticale

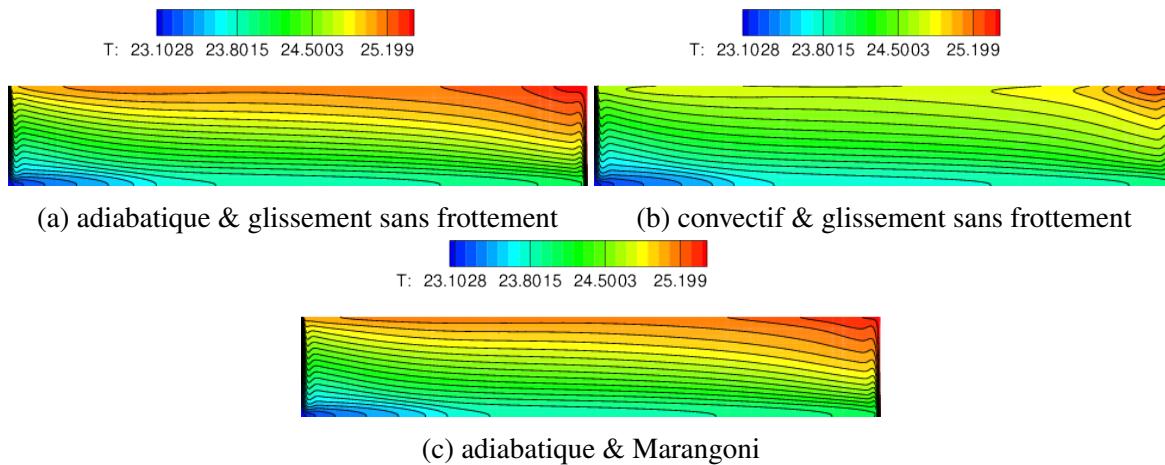


FIGURE 4.21 – Champs de température moyen cavité BTU $\Omega = 0.7 \text{ rpm}$ et $\Delta T = 2.5 \text{ K}$. Le facteur vertical est estimé à $\sigma_z = 0.566$ pour (a) et (c), et $\sigma_z = 0.424$ pour les conditions limites convectives (b).

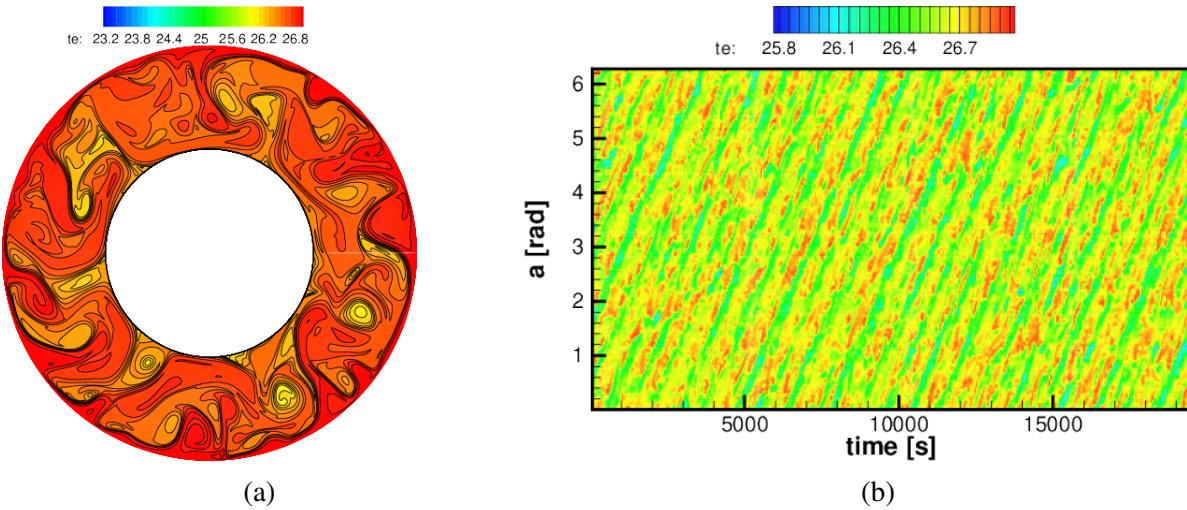
pour les trois modèles de la surface libre. Pour le cas considéré, il semble que le modèle de Marangoni conduise à une stratification proche du modèle glissement sans frottement. La condition aux limites thermique convective se différencie de l'adiabatique. En effet, en proche surface le gradient thermique

Ω	ΔT	CL	σ_z
0.7 rpm	2.5	adiabatique	0.566
0.7 rpm	2.5	Marangoni	0.566
0.7 rpm	2.5	convective	0.424

TABLE 4.3 – Stratification thermique verticale selon le modèle de la surface libre..

vertical est localement inversé du fait d'une température extérieure inférieure. La table 4.3 quantifie les stratifications thermiques verticales à l'aide du paramètre σ_z , confirmant l'analyse sur les champs moyennés de température. L'inversion locale du gradient de température pourrait expliquer le caractère irrégulier de la surface libre que l'on note sur la figure 4.21b.

Vers la trubulence géostrophique. L'accroissement de la vitesse de rotation conduit à un régime de turbulence géostrophique. Récemment une série d'expérimentations a été réalisée par U. Harlander (Cottbus/LAS) avec une vitesse de rotation de 2 rpm et une différence de température de 4.5 K. Une simulation a alors été réalisée afin de compléter les observations expérimentales. La description de l'ensemble des échelles spatiale nécessiter un maillage fin de $1024 \times 300 \times 600$, à l'aide de 1096 coeurs. Un instantanné du champ de température à la surface libre est présentée figure 4.22a. La figure 4.23


 FIGURE 4.22 – Vers la turbulence géostrophique, $\Omega = 2 \text{ rpm}$ et $\Delta T = 4.5 \text{ K}$, (a) température de surface, (b) diagramme de Hövmoller .

présente l'analyse harmonique des champs de température pour différents taux de rotation.

Pour le taux de rotation le plus élevé (cf. Fig. 4.23b), on observe une décroissance significative du spectre des fluctuations de température. De plus, ce spectre est continu et présente deux modes $m = 5$ et $m = 6$ relativement marqués qui sont associés à l'instabilité barocline. On notera que les taux de rotation inférieurs conduisent à des spectres discrets (cf. Fig. 4.23a), soulignant ainsi la transition à la turbulence de cet écoulement.

Conclusions. Ces quelques résultats illustrent la relative souplesse des contributions méthodologiques présentées au chapitre 2. Le code recherche développé sur ces bases permet d'investiguer en un temps raisonnable de nouvelles configurations. Toutefois, il me semble avoir atteint les limites de la diagonalisation successive parallèle. Les perspectives proposées en fin de chapitre 2 relatant l'hybridation MPI/OpenMP mais surtout les techniques itératives me paraissent être les solutions à mettre en oeuvre. D'un point de vu compréhension, de l'écoulement cette première année de simulation/expérimentation nous a permis de couvrir l'ensemble des régimes de l'écoulement.

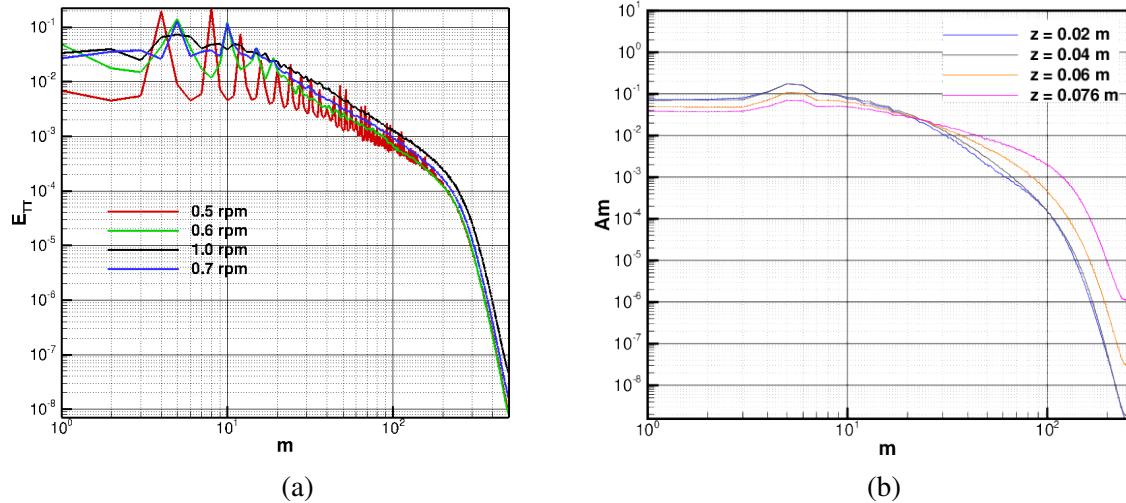


FIGURE 4.23 – Transition vers la turbulence géostrophique (a) accroissement du taux de rotation (b) 2 rpm et $\Delta T = 4.5 \text{ K}$

4.4 Conclusions et perspectives

Ce chapitre présente les résultats de quelques simulations couvrant essentiellement les thématiques des écoulements en milieux confinés et stratifiés en rotation. Pour ces simulations seul le modèle des équations de Navier-Stokes incompressibles a été retenu et traité numériquement à l'aide de la diagonalisation successive parallèle et de l'évaluation des schémas compacts à l'aide de la technique rPDD. Il a ainsi été possible de simuler des écoulements en géométries cartésiennes 3D et 2.5D ainsi qu'en géométries 2.5D cylindriques, illustrant la flexibilité de cette approche. Ceci montre qu'il est possible de conserver une disposition entrelacée des variables et un avancement temporel semi-implicite. La présentation chronologique des simulations met en relief les choix méthodologiques que j'ai faits permettant une utilisation du code de calcul HOCS³ dans un contexte HPC indispensable à la simulation de phénomènes multi-échelle.

En marge des aspects techniques, ce chapitre illustre ma démarche scientifique pour légitimer le travail de fond portant sur les aspects méthodologiques. En effet, en centrant mon activité de recherche sur ces aspects, j'ai dû me positionner sur des écoulements pour lesquels la combinaison HPC ordre élevé semblait être pertinente pour motiver des demandes de financement, de ressources informatiques. Le cadre collaboratif développé avec BTU/LAS et AMU/M2P2 sur les écoulements en rotation stratifiés illustre cette démarche. Elle permet de définir un cadre applicatif d'actualité et me permet de démontrer la fiabilité de conforter ma démarche scientifique pour les ordres élevés dans un mode de production de résultats.

Les perspectives immédiates de ces travaux sont principalement centrées sur la compréhension des phénomènes d'instabilité dans les écoulements en rotation. Cette famille d'écoulement reste un véritable défi à simuler, pour laquelle de nouvelles contributions seront essentielles pour atteindre des N/f représentatif des écoulements atmosphériques. La compréhension de phénomènes à la surface libre revêt un aspect primordial pour lequel la simulation numérique directe reste un outil de prédilection.

Des perspectives à moyen terme concernent la modélisation des écoulements pour lequel la compressibilité est non négligeable. On notera, que de telles perspectives constituent un cadre applicatif pour juger de la pertinence des méthodes numériques et leurs perspectives présentées dans le chapitre précédent.

CHAPITRE 5

MODÈLISATION DE PROBLÈMES NON-RÉGULIERS

Ce chapitre présente une synthèse de mon activité scientifique sur une thématique de *mécanique du contact*. Cette activité est le fruit de la collaboration avec M. Barboteu UPVD/LAMPS et S. Dumont Univ. de Nîmes/IMAG débuté en 2013 avec l’encadrement de thèse de D. DANAN (2016) et suivi de celui de S. CHERKAOUI (2021).

Le point central de ce travail est la modélisation numérique du contact qui se traduit par une loi unilatérale, dite condition de Signorini. Nous avons ainsi développé de nouvelles approches numériques respectant la non-régularité pour ce type de problèmes en mécanique des solides déformables (ABIDE, BARBOTEU, CHERKAOUI, DANAN et al., 2021; ABIDE et al., 2016), et des écoulements granulaires (ABIDE, BARBOTEU, CHERKAOUI & DUMONT, 2021; ABIDE et al., accepted), mais aussi sur des problématiques de changement de phase ou pour des problèmes discrétilisés à l'aide de schémas compacts. Ce chapitre présente les principaux résultats en introduisant trois volets : la modélisation physique conduisant à une condition de Signorini, les méthodes numériques et quelques applications.

5.1 Des modèles de type Signorini

La modélisation mathématique de problèmes de mécanique ou transferts thermiques introduit des conditions aux limites sous une forme d'inégalité. Par exemple en mécanique du contact la condition de non-interpénétration entre deux solides indéformables conduit à ce type formulation. La modélisation de l'ablation de matière par un laser pulsé, ou de l'électro-déposition de peinture conduisent à cette formulation particulière dite loi unilatérale ou loi de Signorini. Les sections ci-dessous présentent deux modélisations mathématiques pour introduire un tel formalisme.

5.1.1 Loi de Signorini pour un modèle de matériau à changement de phase

Les matériaux à changement de phase sont utilisés pour limiter des pics de températures dans les batteries, le stockage d'énergie ou encore l'amélioration du confort thermique. La modélisation mathématique de tels phénomènes se révèle complexe à cause du fait de la présence d'un front de solidification en mouvement et de la formulation mathématique du processus de changement de phase à la température de solidification. Le nombre élevé des travaux de recherche consacré au problème de Stefan illustre la diversité des approches théoriques et numériques (DUVAUT, 1972).

Par exemple, ce problème fournit un cadre mathématique pour l'étude d'inégalités variationnelles (TARZIA, 1996). Concernant leurs résolutions numériques, les méthodes enthalpiques (VOLLER et al., 1981) sont couramment utilisés du fait de leur robustesse. De récents travaux modélisent avec succès l'ablation de matière par laser en formulant le changement de phase par une condition de Signorini

(CLAUS et al., 2019 ; NARIMANYAN, 2009). Dans le cadre de thèse de M. M. S. BINOUS (2017) un travail exploratoire a été mené pour modéliser le comportement thermique de matériaux à changement de phase qui seraient déposés en une fine couche sur un solide SABEUR et al. (2017). Ci-dessous, je m'appuie sur cette modélisation pour introduire une première fois le concept de condition unilatérale ou condition de Signorini.

Le cadre physique est celui d'un matériau solide (cf. Fig. 5.1) dont d'une partie de la frontière est recouverte d'un matériau à changement de phase. Par ailleurs, cette frontière est soumise à une densité

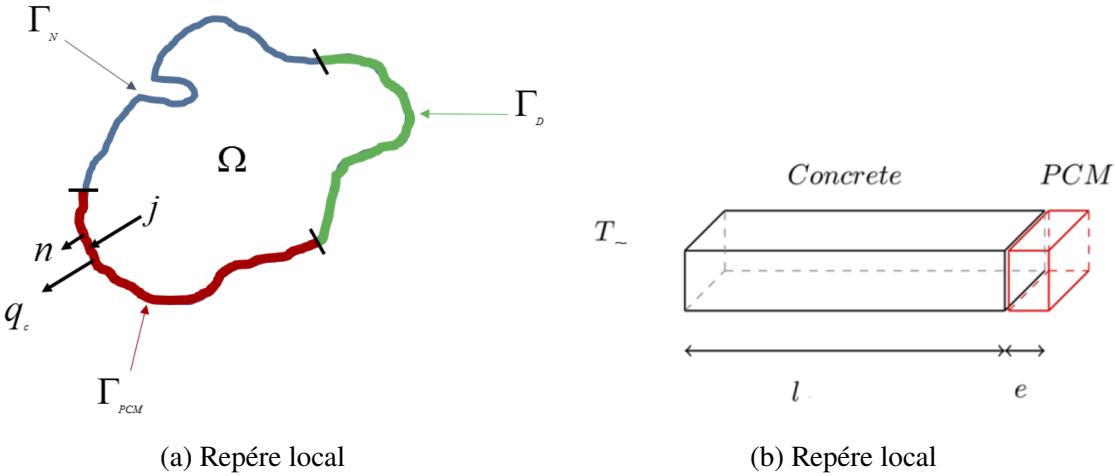


FIGURE 5.1 – Modèle physique pour le changement de phase surfacique.

de flux thermique de composante normale notée i . Si l'on considère un domaine unidimensionnel $\Omega = [0, L]$, la température satisfait à :

$$\rho C_p \partial_t T - \kappa \partial_x^2 T = 0 \text{ sur } \Omega \quad (5.1)$$

où κ est le coefficient de diffusion thermique, ρ la densité et C_p la capacité calorifique. On impose la température sur la paroi gauche $x = 0$ et la paroi de droite est recouverte d'un PCM. Ce matériau est caractérisé par une température de solidification constante T_m et d'une quantité de chaleur latente Q_l . Si la température à l'extrémité $T(x = L) = T_L$ est égale à la température de solidification T_m alors la quantité $\sigma = -\kappa \partial_x T - j > 0$ alimente le processus de changement de phase. Si la température T est inférieure à T_m le PCM est à l'état solide et par conséquent $\sigma = 0$, en d'autres termes le flux j est prescrit. Une expression mathématique de cette condition particulière est donnée par :

$$\begin{cases} \sigma = \lambda - i \geq 0 & \text{en } x = L \\ T - T_m \leq 0 & \text{en } x = L \\ (T - T_m)(\lambda - i) = 0 & \text{sur } \Gamma \end{cases} \quad (5.2)$$

où $\lambda = -\kappa \partial_x T$ désigne le flux diffusif en $x = L$. Ce système de conditions s'appelle les conditions unilatérales ou de Signorini. On notera que c'est une loi multivoque et non-régulière pour laquelle des méthodes numériques spécifiques sont à mettre en œuvre.

Durant la thèse de M.S. M. S. BINOUS (2017), une technique de projection itérative (S. ZHANG et al., 2013) a été employée sur la discrétisation temporelle du problème 5.1 avec les conditions 5.2. Un mur recouvert d'une couche de PCM et soumis à un flux périodique j a été simulé. Nous avons comparé notre modèle avec une méthode enthalpique pour laquelle le front de solidification est simulé (cf. Fig. 5.2). On constate sur la figure (5.2) que dans la limite des faibles épaisseurs les deux modèles prédisent un comportement identique. Le principal intérêt du modèle fine couche est que l'on s'affranchie d'une résolution couplée. Elle peut s'avérer coûteuse nous permettant de réaliser la simulation d'une cavité différemment chauffée avec un flux de chaleur périodique avec ce type de condition

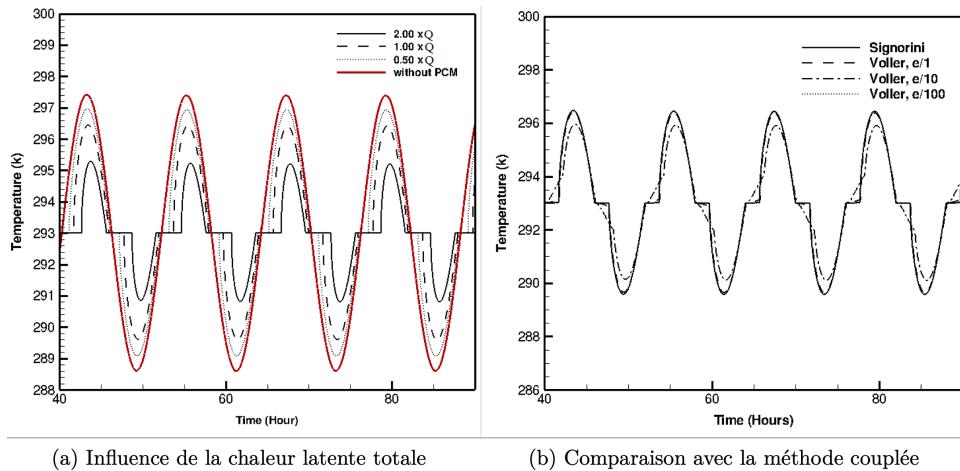


FIGURE 5.2 – Evolution temporelle de la température du PCM en $x = L$ (a) influence de la chaleur latente disponible (b) comparaison avec la méthode de Voller .

aux limites (M. S. BINOUS et al., 2016; LAGE et al., 1993).

On notera que deux nombreux problèmes se formulent à l'aide d'un problème d'Helmholtz avec une condition de Signorini. Les problèmes d'écoulement en milieu poreux pour lesquels on cherche à déterminer les zones de suintement (AITCHISON et al., 1983), ou encore de dépôt de peinture par processus électrochimique (AITCHISON et al., 1984) sont considérés comme des modèles de référence (S. ZHANG et al., 2013). Le modèle mathématique retenu est la forme stationnaire 5.1 du problème 2d/3d avec la condition aux limites 5.2. Il convient alors de chercher la solution u sur le domaine Ω ainsi que la paire dual (u, λ) sur Γ_s pour le problème suivant :

$$\begin{aligned} -\Delta^2 u &= s \\ u &= g \text{ sur } \Gamma_d ; \lambda = f \text{ sur } \Gamma_n \\ \lambda &\geq f, u \leq g, (\lambda - f)(u - g) \text{ sur } \Gamma_s = 0 \end{aligned} \tag{5.3}$$

Ce problème sera considéré en section 2 de ce chapitre pour illustrer les approches numériques de projection itérative et Primal Dual Active Set.

5.1.2 Problèmes multi-contact en milieu granulaire

Le phénomène de contact entre deux particules solides se formalise par une condition dite de contact unilatéral. Par le biais des travaux réalisés avec S. CHERKAOUI (2021) sur la modélisation des milieux granulaires, j'introduis cette condition de Signorini pour le contact. On considère ici un ensemble de grains indéformables, ou un milieu granulaire, soumis à une interaction de type contact et mis en mouvement par un apport d'énergie mécanique externe (parois mobiles, conditions initiales hors équilibres,...). Bien que les équations de mouvement des particules soient bien connues, le mouvement d'ensemble du milieu granulaire se montrent complexe à cause de la non-linéarité associée aux contacts. La modélisation mathématique du contact entre deux particules rigides s'obtient en introduisant deux repères. Le premier commun au deux particules, ou repère global, est introduit pour décrire la dynamique et résoudre les équations de mouvement. Le second est un repère local associé à deux particules potentiellement en contact : il sert à exprimer les interactions de contact. La figure (5.3) présente ces deux repères et les notations pour décrire la cinématique des particules. La loi de contact entre une particule rigide P_i de masse m_i avec une particule P_j de masse m_j se décrit dans le repère local associé au contact α . Il est défini par un vecteur unitaire normal \mathbf{n}_α et le vecteur tangentiel \mathbf{t}_α . La cinématique et la dynamique du contact est caractérisée par le déplacement local \mathbf{u}_α et l'impulsion de contact \mathbf{p}_α au point de contact M_α . On note également $\dot{\mathbf{u}}_n$ et $\dot{\mathbf{u}}_t$ les composantes

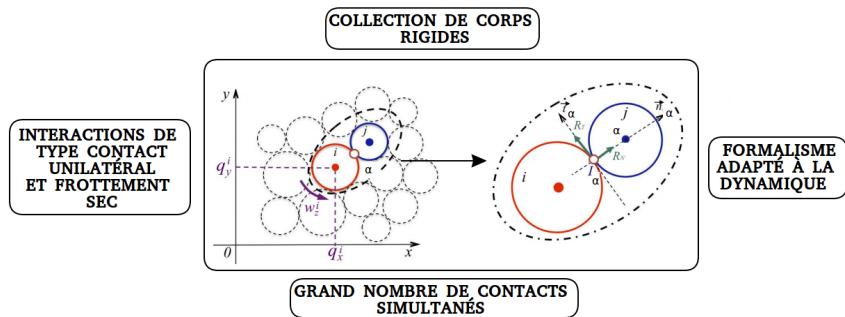


FIGURE 5.3 – Schématisation du passage de l'espace global des particules à l'espace local des contact.

normale et tangentielle de la vitesse $\dot{\mathbf{u}}$ définie par $\dot{u}_n = \dot{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{n}$, $\dot{u}_t = \dot{\mathbf{u}} - u_n \mathbf{n}$. Enfin, p_n et \mathbf{p}_t représentent les impulsions de contact normal et tangentiel sur le point de contact, définies par $p_n = (\mathbf{p} \mathbf{n}) \cdot \mathbf{n}$ et $\mathbf{p}_t = \mathbf{p} \mathbf{n} - p_n \mathbf{n}$. La figure (5.4) contextualise ces notations. La modélisation mathématique du contact

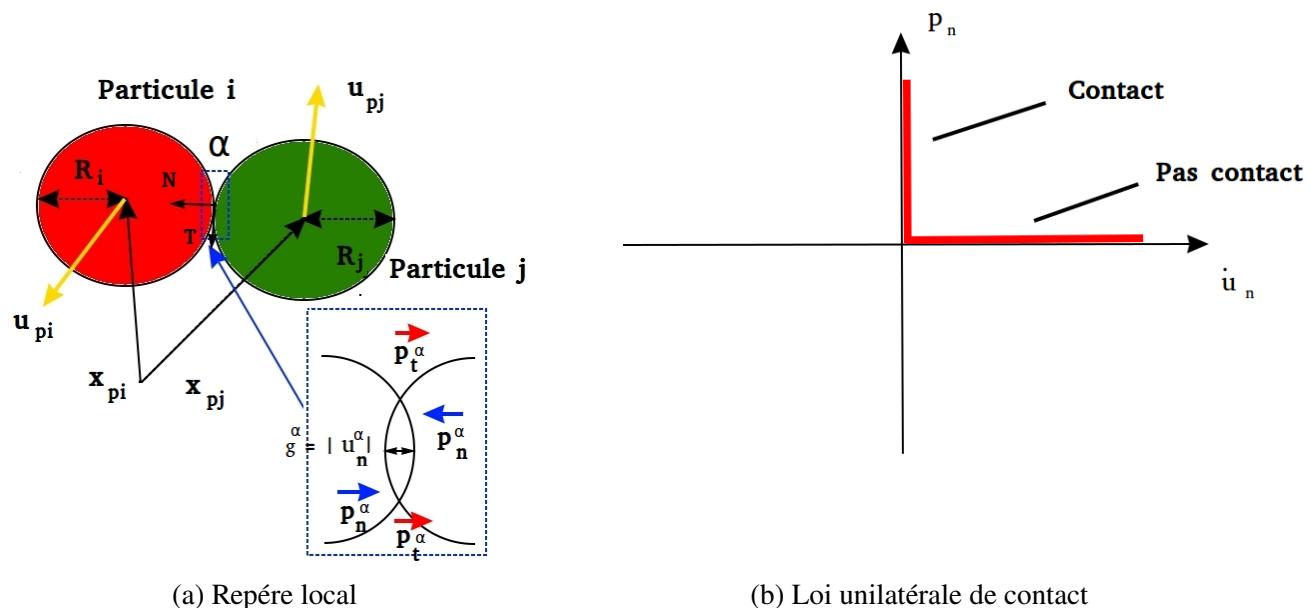


FIGURE 5.4 – Modélisation d'un problème de contact multi-corps rigides.

se base sur la distance u_n entre une particule P_i et sa projection sur une autre particule P_j , on parle alors du gap g^α . Si le gap est positif aucune contrainte n'est exercée et par conséquent, l'impulsion de contact normale p_n est nulle. Si le gap g^α devient négatif, une impulsion de contact normale p_n répulsive naît au point de contact M_α . L'intensité dépend des forces qui agissent sur les deux particules (cf. Fig. 5.4). Ce comportement définit une relation de complémentarité, appelée loi de Signorini SIGNORINI, 1933, reliant la vitesse normale \dot{u}_n à l'impulsion de contact normale p_n . La formalisation mathématique de cette condition de contact est alors donnée par :

$$\text{Si } g^\alpha > 0 \text{ alors } p_n^\alpha = 0, \quad (5.4)$$

$$\text{Si } g^\alpha \leq 0 \text{ alors}$$

$$\dot{u}_n^\alpha \geq 0, \quad (5.5)$$

$$p_n^\alpha \geq 0, \quad (5.6)$$

$$\dot{u}_n^\alpha p_n^\alpha = 0, \quad (5.7)$$

Les relations 5.4–5.7 conduisent aux conditions d'une loi de contact complète telle que formulée par (MOREAU, 1988). La dernière condition (5.7), est une relation de complémentarité qui assure la conservation de l'énergie (voir (DUBOIS et al., 2018) pour plus de détails). Cette condition, également appelée condition de persistance, signifie qu'une impulsion de contact normale p_n n'apparaît que lors d'un contact persistant préservant ainsi la quantité d'énergie avant et après le choc. J-J. Moreau a prouvé que ces conditions assurent la non interpénétrabilité entre les corps ; voir le Lemme de viabilité de Moreau (cf. (MOREAU, 1994, 1999)). La représentation graphique de la loi de contact unilatéral est donnée par figure 5.4. Elle est alors à imposer sur l'ensemble des contacts possibles entre deux pas de temps discret du schéma temporel. La vitesse à laquelle l'on souhaite imposer la loi de contact est la moyenne pondérée entre \dot{u}_n^- et \dot{u}_n^+ , les vitesses avant et après le contact. Ce choix conduit à la définition suivante de la vitesse dite de Moreau :

$$\dot{u}_n = \frac{\dot{u}_n^+ + e_n \dot{u}_n^-}{(1 + e_n)} \quad (5.8)$$

où e_n est le coefficient de restitution. On remarquera que pour $e_n = 1$ la vitesse avant choc est conservée et par conséquent l'énergie cinétique l'est aussi.

La modélisation du changement de phase et celle du contact entre particules partagent ainsi cette même condition de Signorini.

Toutefois dans le cas des milieux granulaires la paire duale résultante est à associer aux équations de mouvement formulées en terme de mesures différentielles et qui s'écrivent :

$$\mathbb{M}d\dot{\mathbf{q}} + \mathbf{F}^{int}(t, \mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})dt = \mathbf{F}^{ext}(t, \mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})dt + d\mathbf{R} \quad (5.9)$$

où

- \mathbb{M} représente la matrice des masses généralisée,
- \mathbf{F}^{int} et \mathbf{F}^{ext} représentent les forces intérieures et extérieures s'exerçant sur le système,
- $d\mathbf{R}$ une mesure réelle non négative représentant les impulsions de contact entre particules

Ces équations de mouvement et la loi de contact persistant (5.4) – (5.7) sont discrétisées à l'aide d'un θ -schéma implicite en temps et d'un algorithme de Gauss-Seidel non-linéaire. Dans la suite de ce mémoire, nous allons utiliser la loi de contact unilatérale en vitesse sous la forme d'une équation de complémentarité. Ceci permet de donner un formalisme numérique pour ce type de problème. Pour ce manuscrit le détail de la méthodologie étendue au frottement n'est pas présenté. Le lecteur est invité à se référer aux articles ABIDE, MANSOURI et al. (2021), ABIDE et al. (accepted) et au manuscrit de thèse de S. CHERKAOUI (2021) pour ces points relativement techniques. La formulation de la condition de Signorini en équation de complémentarité est le dénominateur commun que ce soit pour le problème de Poisson, d'élasticité linéaire ou de milieu granulaire. La section suivante présente donc la fonction de complémentarité associée à la condition de Signorini.

5.1.3 Condition de Signorini et fonction de complémentarité

La modélisation mathématique de problème en thermique ou mécanique introduit une loi unilatérale ou dite de Signorini. Pour simplifier considérons la loi suivante, en faisant abstraction de la physique qui est à son origine :

$$\lambda \geq 0, u \leq 0, \lambda u = 0 \quad (5.10)$$

On notera qu'il existe des interprétations différentes, comme la minimisation de l'énergie, formulation d'inclusion (ALART et al., 1991). Les approches numériques proposées pour ce travail s'articulent autour de l'équation de complémentarité pour la paire duale u, λ suivante :

$$\mathcal{R}(u, \lambda) = \lambda - [\lambda + cu]_+ = 0 \quad (5.11)$$

où $[\phi]_+ = \max(0, \phi)$. En effet, on démontre que cette équation de complémentarité est équivalente à la loi de Signorini 5.10 pour différentes modélisations (thermique, granulaire et déformable) (ABIDE,

MANSOURI et al., 2021 ; ABIDE et al., 2016 ; ABIDE et al., accepted). $\mathcal{R}(u, \lambda)$ est une fonction non-linéaire et non-régulière dont la recherche des racines est donnée par l'intersection entre le plan $z = 0$ et la surface caractéristique $z = \mathcal{R}(u, \lambda)$

L'approche retenue pour la recherche des racines est la méthode de Newton. Toutefois, la difficulté réside dans le caractère non-régulier $\mathcal{R}(u, \lambda)$ qui nécessite des précautions lors du calcul du Jacobien. Notre choix s'est porté sur une méthode de Newton non-lisse pour lequel le calcul des différentielles généralisées (dérivée au sens de Gâteaux) de $\mathcal{R}(u, \lambda)$ possèdent les propriétés suffisantes pour assurer la convergence de la méthode de Newton. Ce point est discuté à la section suivante.

5.2 Méthodes numériques

Une condition de Signorini est l'expression d'une relation multivoque dont le traitement numérique se révèle délicat. Il est alors nécessaire de recourir à des méthodologies spécifiques telles que la régularisation ou le Lagrangien Augmenté. Depuis la thèse de D. Danan, nous avons développé de nouvelles approches pour traiter cette condition de Signorini pour les solides déformables en contact sur fondation rigide et pour simuler les milieux granulaires. La démarche adoptée est basée sur la mise en œuvre du solveur non-linéaire de Newton semi-lisse. Cette section illustre nos contributions sur cet aspect numérique pour un problème d'Helmholtz avec une condition de Signorini sur le bord 5.3.

5.2.1 Méthode de Projection Itérative

Une des techniques récentes pour assurer la condition de Signorini est la méthode de projection itérative X. LI et al. (2019), S. ZHANG et al. (2013). Initialement développée pour la résolution numérique du problème d'Helmholtz 5.3, nous l'avons étendu aux solides déformables en contact sur fondation rigide durant la thèse de D. DANAN (2016) (ABIDE et al., 2016). Elle consiste à exploiter la relation de complémentarité équivalente à la formulation de Signorini, soit :

$$(u - f) - [(u - f) - c(\partial_{\mathbf{n}} u - g)]_+ = 0 \quad (5.12)$$

avec $c > 0$ et $[a]_+ = \max(0, a)$ désignant l'opérateur de projection. S. ZHANG et al. (2013) proposent un processus itératif en argumentant sa convergence vers la solution du problème d'Helmholtz. Cela consiste à itérer sur l'équation de point fixe 5.12 de la manière suivante :

$$(u^{k+1} - f) - [(u^k - f) - c(\partial_{\mathbf{n}} u^{k+1} - g)]_+ = 0 \quad (5.13)$$

où la solution u^{k+1} satisfait au problème linéaire suivant :

$$\begin{cases} -\nabla \cdot \nabla u^{k+1} = s & \text{in } \Omega \\ u^{k+1} = f & \text{on } \bar{\Gamma}_{sn}^{k+1} \\ u^{k+1} + c\partial_{\mathbf{n}} u^{k+1} = u^k + cg & \text{on } \Gamma_{sn}^{k+1} \end{cases} \quad (5.14)$$

avec $\Gamma_{sn}^{k+1} = \{x \in \Gamma_s \mid (u^k - f) - c(\partial_{\mathbf{n}} u^k - g) > 0\}$ et $\bar{\Gamma}_{sn}^{k+1} = \Gamma_s / \Gamma_{sn}^{k+1}$. La preuve de convergence de cet algorithme est détaillée dans (S. ZHANG et al., 2013) quelque soit $c > 0$.

Cette approche s'étend aisément au problème de contact entre un solide déformable et une fondation rigide. Pour ce type de problème de contact, la méthode de projection itérative consiste à résoudre une série de problèmes d'élasticité linéaire dont on imposera une traction libre ou un déplacement selon le statut du contact, s'apparentant aux méthodes de type active set (HINTERMÜLLER et al., 2002). La figure (5.5) présente un résultat pour le problème de contact de Hertz pour lequel une solution

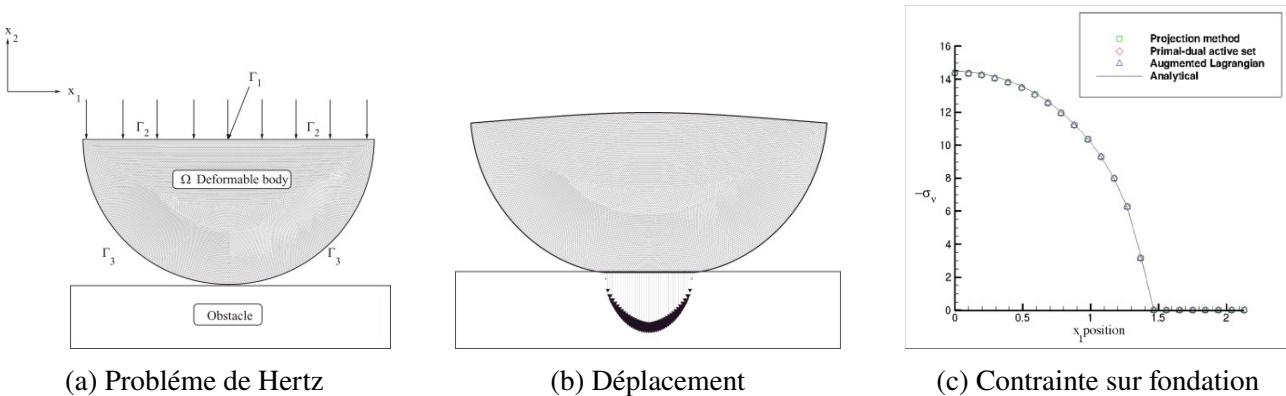


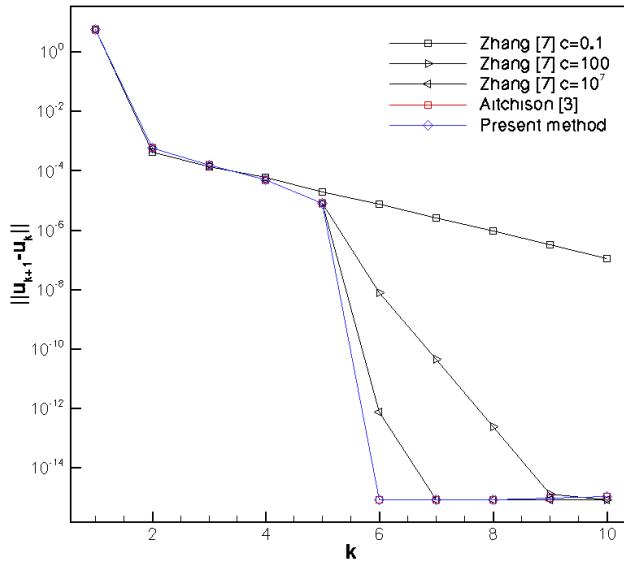
FIGURE 5.5 – Le problème de contact de Hertz.

analytique existe. Les premières investigations ont montré que le nombre des itérations non-linéaires tendait vers un minimum pour les grandes valeurs de c (DANAN, 2016). Cette propriété a été analysée plus en détail avec S. Cherkaoui dans un cadre le cadre du problème de Poisson dans l'article (ABIDE, MANSOURI et al., 2021).

Ainsi, en s'appuyant sur une formulation équivalente de l'ensemble actif, on démontre que dans la limite des grandes valeurs de c on obtient le schéma itératif suivant :

$$\begin{cases} -\nabla \cdot \nabla u^{(k+1)} = s & \text{on } \Omega \\ u^{(k+1)} = f & \text{in } \bar{\Gamma}_{sn}^{(k+1)} \\ \partial_{\mathbf{n}} u^{(k+1)} = g & \text{in } \Gamma_{sn}^{(k+1)} \end{cases} \quad (5.15)$$

pour lequel $\Gamma_{sn}^{k+1} = \{x \in \Gamma_{sn}^k : 2u^k - u^{k-1} > f\}$ est l'ensemble des nœuds actifs. Ce schéma se trouve être similaire en tous point à l'algorithme de switching (AITCHISON et al., 1998), à l'exception du calcul de l'ensemble Γ_{sn}^{k+1} qui est déterminé par $\Gamma_{sn}^{k+1} = \{x \in \Gamma_s^k : u^k > f\}$. La comparaison du nombre d'itérations non-linéaire entre la méthode de projection itérative, l'algorithme 5.15 et la méthode de switching (AITCHISON et al., 1998) est présentée figure (5.6). Cette expérimentation numérique a été


 FIGURE 5.6 – Convergence de la différence absolue $\delta_k = \|u^k - u^{k-1}\|_2$.

réalisée pour le problème de dépôt électrochimique de peinture (AITCHISON et al., 1984). On constate que les plus grandes valeurs de c conduisent à une meilleure convergence, et que la convergence de l'algorithme 5.15 et la méthode de switching sont identiques corroborant l'analyse précédente.

5.2.2 Méthode Primal Dual Active Set

La méthode de projection itérative repose sur une démarche heuristique du traitement de la recherche des racines de la fonction de complémentarité, conduisant ainsi à la définition d'ensemble actif et inactif. Avec l'article (ABIDE et al., 2016), nous proposons une formulation alternative reposant sur le formalisme de solveurs de Newton non-lisses appliquée fonction de complémentarité 5.10. Tout comme la méthode de projection itérative, on formalise des ensembles actifs et inactifs identiques aux méthodes Primal Dual Actif Set utilisées en contrôle optimal avec contraintes (BERGOUNIOUX et al., 1999). Ce lien entre méthode de Newton non-lisse pour la fonction de complémentarité et méthode PDAS est explicité par HINTERMÜLLER et al. (2002). Il s'agit là du trait commun avec la méthode de projection itérative (S. ZHANG et al., 2013) ou celle du sweeping (AITCHISON et al., 1998). La difficulté avec la méthode de Newton semi-lisse réside dans la relation de complémentarité qui est non-différentiable au sens classique du fait de l'opérateur de projections $[.]_+$. La notion de différentiabilité doit être généralisée comme indiquée dans HINTERMÜLLER et al. (2002). Ci-après je détaille présente les grandes étapes de l'écriture de la méthode de Newton semi-lisse pour la fonction de complémentarité.

Le cadre retenu pour cette illustration est celui du problème modèle d'Helmholtz avec une condition de Signorini imposée sur une portion de la frontière 5.3. Dans un premier temps on considère la discrétisation du problème de Poisson d'inconnues \mathbf{u} en exprimant le dual de sur la frontière Γ_s noté $\lambda \mathbf{n} = \partial_{\mathbf{n}} \mathbf{u}$. Ce système d'équations est alors linéaire et se note formellement $\mathcal{R}^u(\mathbf{u}, \lambda) = A(\mathbf{u}) + \lambda \mathbf{n} - f = 0$. De même, sur chaque noeud de la frontière Γ_s , nous définissons $\mathcal{R}^\lambda(\mathbf{u}, \lambda) = \lambda - [\lambda + c\mathbf{u}]_+ = 0$ la relation de complémentarité que l'on cherche à satisfaire. Avec ces notations la discrétisation de notre problème s'écrit formellement :

$$\mathcal{R}(\mathbf{u}, \lambda) = \begin{pmatrix} \mathcal{R}^u(\mathbf{u}, \lambda) \\ \mathcal{R}^\lambda(\mathbf{u}, \lambda) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.16)$$

En se donnant une paire duale initiale $(\mathbf{u}^0, \lambda^0)$, le formalisme de Newton semi-lisse conduit à la séquence itérative $k > 0$ suivante :

$$\begin{cases} \Delta \mathcal{R}^u(\mathbf{u}^k, \lambda^k) \delta \mathbf{u}^{k+1} = -\mathcal{R}^u(\mathbf{u}^k, \lambda^k) \\ \Delta \mathcal{R}^\lambda(\mathbf{u}^k, \lambda^k) \delta \lambda^{k+1} = -\mathcal{R}^\lambda(\mathbf{u}^k, \lambda^k) \end{cases} \quad (5.17)$$

où les incrément sont notées $\delta \mathbf{u}^{k+1} = \mathbf{u}^{k+1} - \mathbf{u}^k$, $\delta \lambda^{k+1} = \lambda^{k+1} - \lambda^k$, et $\Delta \mathcal{R}^u, \Delta \mathcal{R}^\lambda$ désignent les différentielles généralisées. Le calcul de $\Delta \mathcal{R}^u$ ne pose pas de difficulté car la forme discrète est linéaire. Concernant la relation de complémentarité $\Delta \mathcal{R}^\lambda$, le calcul de la différentielle repose sur l'existence de la dérivée directionnelle de \mathcal{R}^λ . Ce dernier est donné par :

$$\Delta \mathcal{R}^\lambda(\mathbf{u}, \lambda) = \chi(x) d\mathbf{u} - \bar{\chi}(x) c d\lambda \text{ pour } x \in \Gamma_s \quad (5.18)$$

où χ est la fonction indicatrice de l'ensemble des noeuds actifs $\mathcal{A} = \{x \in \Gamma_{sn}^k : 2\mathbf{u}^k - \mathbf{u}^{k-1} > f\}$ et $\bar{\chi}(x) = 1 - \chi(x)$. Le résultat de convergence de la méthode de Newton semi-lisse est donné par HINTERMÜLLER et al. (2002) : il s'appuie sur le fait que la différentielle généralisée est une forme linéaire. De plus, on remarquera que la différentielle $\Delta \mathcal{R}^\lambda(\mathbf{u}, \lambda)$ prend les valeurs $d\mathbf{u}$ ou $d\lambda$ selon le signe $\lambda + c\mathbf{u}$ à l'interface. En pratique cela revient à chercher l'incrément $(\delta \mathbf{u}^{k+1}, \delta \lambda^{k+1})$ en prescrivant une condition de type Dirichlet sur l'ensemble actif et Neumann sur l'ensemble inactif. Pour notre problème modèle de Laplace, la procédure se décrit alors de la manière suivante :

- (i) Choix d'une paire duale initiale $(\mathbf{u}^{(0)}, \lambda^{(0)})$, posons $k = 0$.
- (ii) Détermination de l'ensemble actif $\mathcal{A}^{(k)} = \{x \in \Gamma_s : \lambda^{(k)} + c\mathbf{u}^{(k)} > 0\}$ et par complément de l'ensemble inactif $\mathcal{I}^{(k)} = \mathcal{A}^{(k)} \setminus \Gamma_s$

(iii) Calcul de l’itérée $k + 1$ ($u^{(k+1)}, \lambda^{(k+1)}$) satisfaisant au problème :

$$\begin{cases} -\nabla^2 u^{(k+1)} = s & \text{sur } \Omega \\ u^{(k+1)} = f & \text{sur } \mathcal{A}^{(k)} \\ \lambda^{(k+1)} = g & \text{sur } \mathcal{I}^{(k)} \end{cases} \quad (5.19)$$

Les similitudes avec la méthode de projection itérative (S. ZHANG et al., 2013) et la méthode de switching sont ainsi clairement établies. La mise en œuvre la méthode de Newton non-lisse semble préférable, car elle définit un cadre théorique et une méthodologie que qui lui confère une généralité. Ainsi, au cours des encadrements doctoraux de D. Danan ou S. Cherkaoui, nous avons ainsi décliné cette approche pour les milieux déformables sans et avec frottement (ABIDE, MANSOURI et al., 2021 ; ABIDE et al., 2016), les milieux granulaires avec frottement (ABIDE, MANSOURI et al., 2021 ; ABIDE et al., accepted). La section suivante s’attache à décrire les principaux résultats obtenus à l’aide de la méthode PDAS et la méthode de projection itérative pour ces applications en mécanique.

5.3 Simulations de problèmes avec condition de Signorini

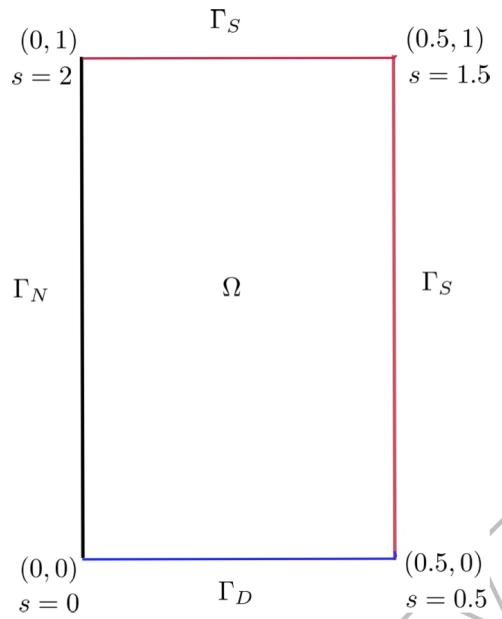
Cette section présente quelques simulations de problèmes non réguliers afin d’illustrer les deux techniques de projection itérative et Primale Dual Active Set. La première section est consacrée au problème de Laplace avec condition de Signorini et discrétisé par schémas compacts. Les autres sections concernent l’application de la méthode PDAS pour la simulation de milieu granulaire. Quant à la dernière section, elle présente des résultats d’un travail exploratoire sur les écoulements chargés en particules.

5.3.1 Schémas compacts pour problèmes non-réguliers

Les méthodes d’ordre élevé sont connues pour être peu compatibles avec les solutions non-régulières. Cependant, dans le cas du problème de Poisson avec une condition de type Signorini, la non-régularité reste locale. La question de la pertinence d’une précision d’ordre élevé pour ce type de problème se pose légitimement. On propose des éléments de réponse dans l’article (ABIDE, MANSOURI et al., 2021) et s’appuyant sur le préconditionneur de bas ordre (ABIDE, 2020). Je présente ci-après les résultats les plus significatifs.

Le modèle physique est celui de l’électrodéposition (AITCHISON et al., 1984) dont la formulation mathématique conduit à l’équation d’Helmholtz 5.3 (cf. Fig. 5.7). La condition de Signorini est appliquée sur la frontière Γ_s dont on observe la non-régularité induite sur la solution autour de l’abscisse curviligne $s = 1.5$ sur le coin supérieur droit (cf. Fig. 5.7b). La courbe traduit une saturation de la condition de type Dirichlet $u = 0$, qui marque un plateau pour $1.4 < s < 1.6$. Ce type de résultat est caractéristique des problèmes contraints tels que les problèmes d’obstacle : une membrane soumise à la déformation de son propre poids, mais avec un déplacement limité par un obstacle. On notera que la solution numérique ne présente pas d’oscillations parasites au niveau de la discontinuité, soulignant le bon comportement des schémas compacts bien qu’un schéma d’ordre 4 et 6 aient été utilisés. Ceci confirme une non-régularité plutôt faible : dérivées premières continues et saut des dérivées secondes bornées.

Toutefois, les différentes expérimentations numériques menées dans (ABIDE, MANSOURI et al., 2021), et basée sur la méthode des solutions manufacturées employées par CASCAVITA et al. (2020), ont mis en évidence que la précision numérique effective est dégradée selon le degré de non-régularité de la solution. Cette conclusion est similaire à celle de CASCAVITA et al. (2020) pour tester la discrétisation HHO. La figure 5.8 montre les erreurs numériques pour différentes précisions allant de l’ordre 2 à 6. Pour ce problème, la condition aux limites de Signorini porte sur le rayon intérieur. On remarque que l’erreur maximale se situe dans les deux lieux où la solution perd sa régularité. Ceci correspond



(a) Problème d'électrodéposition

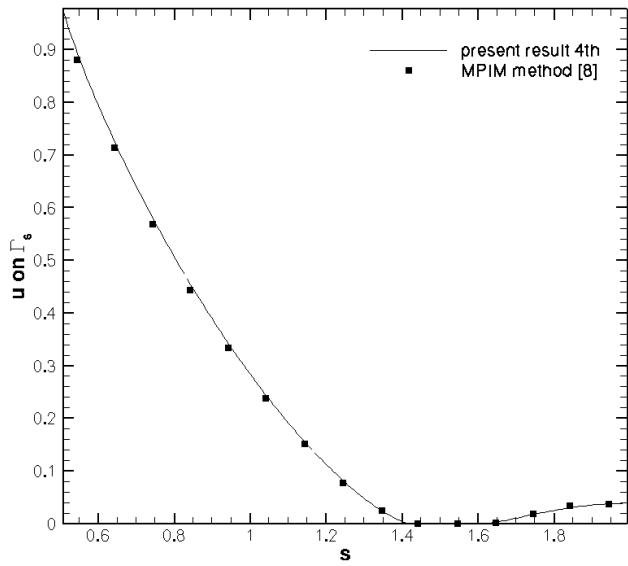

 (b) Solution sur le bords Γ_S

FIGURE 5.7 – Le problème d'électrodéposition : configuration et solution sur la frontière de Signorini.

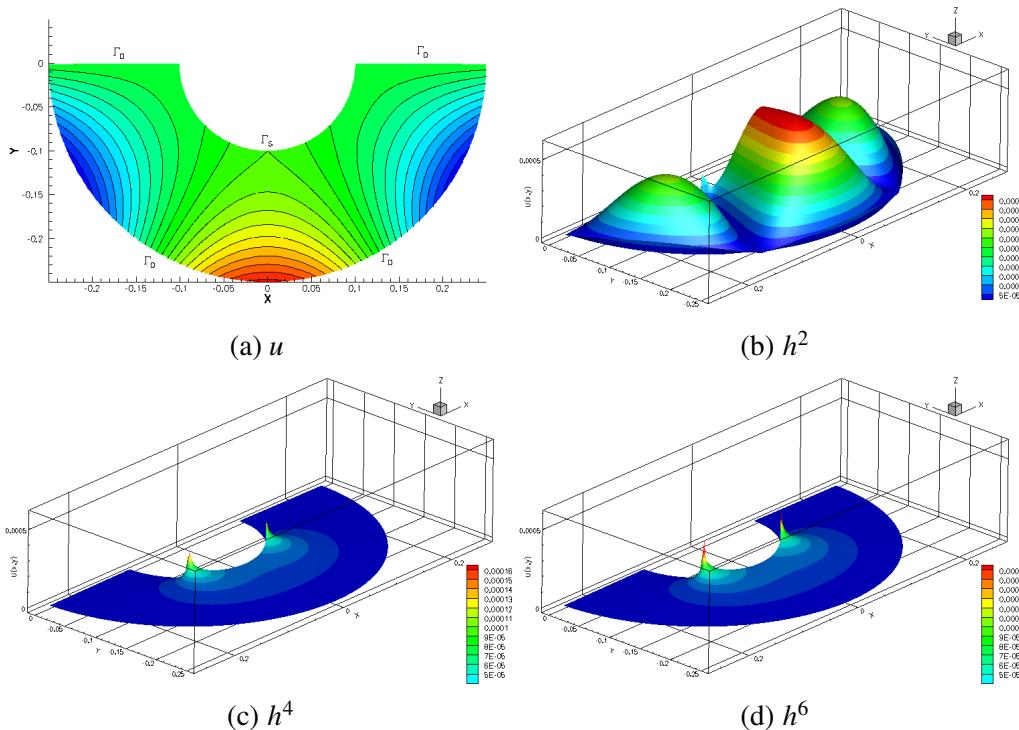


FIGURE 5.8 – Le problème d'Helmholtz en domaine annulaire avec une frontière de Signorini.

à la modification du statut actif/inactif ou, en d'autres termes, à la transition entre une saturation de la condition de Dirichlet et la condition de Neumann. Néanmoins, le niveau de l'erreur numériquement obtenu avec les schémas d'ordre élevé est inférieur l'ordre 2 dans les zones de régularité de la solution. Ce résultat me paraît illustrer une propriété des schémas compacts qui est de confiner l'erreur numérique dans les zones de non-régularité de la solution.

5.3.2 Ecoulements granulaires

L'étude des écoulements granulaires est au centre de nombreuses applications : phénomènes d'avalanche, astrophysique, procédés industriels de dépollution... Pour la simulation des écoulements en milieu granulaire, la méthode Discret Element Method (DEM) de CUNDALL et al. (1979) reste extrêmement populaire dans la communauté des sciences de l'ingénieur. Ceci s'explique par un schéma d'intégration explicite et une loi de contact régularisée résultant du modèle masse-ressort amortisseur. La contrepartie de cette simplicité réside dans un pas de temps très restrictif pour limiter l'interpénétration géométrique (PAULICK et al., 2015) inhérente au modèle DEM. Le travail de S. CHERKAOUI (2021) a consisté à étendre la méthode PDAS pour l'étude des milieux granulaires constitués de solides indéformables selon le formalisme NSCD (MOREAU, 1994), puis à discuter les performances par comparaison avec la DEM. Pour faciliter ce travail qui inclut la parallélisation, le parti pris a été celui d'implémenter l'approche NSCD-PDAS dans le solveur open source MFIX-EXA (GARG et al., 2012 ; MUSSER et al., 2022). Ce solveur est spécialisé dans le couplage fluide particule (CFD-DEM) en environnement massivement parallèle. Je présente ci-après une sélection résultats illustrant les propriétés les plus remarquables de notre approche NSCD-PDAS au regard d'une méthode de référence. Afin de simplifier la lecture, j'omets une présentation détaillée des cas testés mais le lecteur peut les retrouver dans le manuscrit de thèse de S. CHERKAOUI (2021) ou les articles (ABIDE, MANSOURI et al., 2021 ; ABIDE et al., accepted).

Conservation de l'énergie cinétique La propriété de conservation de l'énergie cinétique caractérise l'approche NSCD. Pour la méthode NSCD-PDAS, nous l'avons vérifié en considérant un système de particules se déplaçant dans une boîte bi-dimensionnelle, avec une vitesse initiale aléatoire. Le champ de gravité et les frottements sont négligés, conduisant alors un système mécanique pour lequel l'énergie cinétique est conservée si le coefficient de restitution est unitaire. La conservation de l'énergie cinétique du système est étudiée pour différents coefficients de restitution (cf. Fig. 5.9). Les tests ont été réalisés

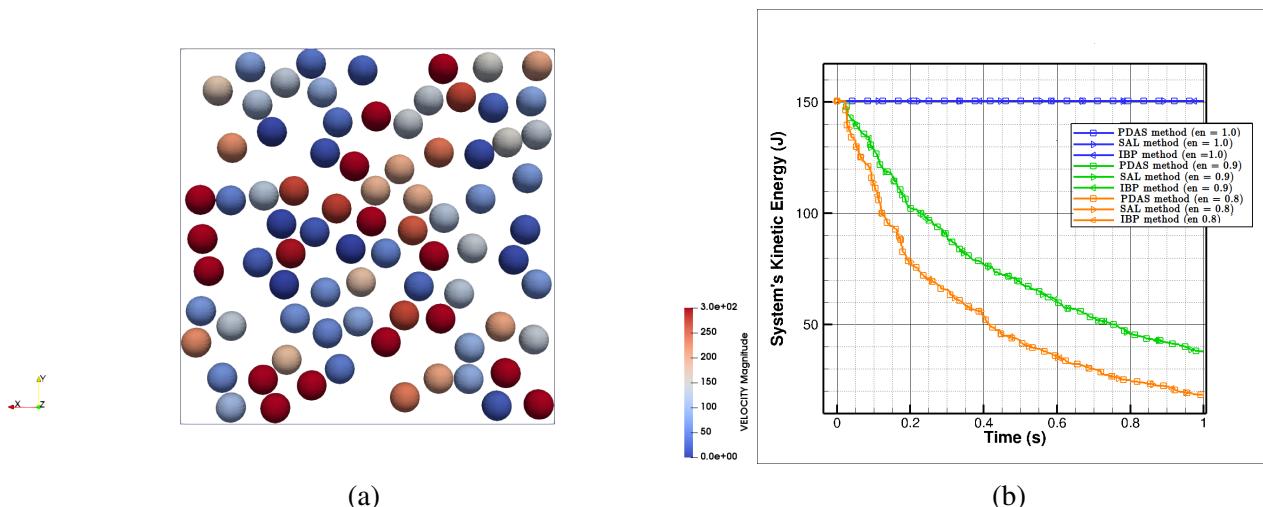


FIGURE 5.9 – (a) Distribution des particules à $t > 0$ et (b) évolution temporelle de l'énergie cinétique pour les méthodes Primal Dual Active Set, Bi-Potentiel, Lagragien Augmenté.

avec 2 méthodes complémentaires : le Lagrangien Augmenté et Bi Potentielle améliorée. Cette dernière figure montre que la conservation de l'énergie cinétique est effectivement réalisée.

Ecoulement granulaire dans un tambour rotatif. Notre solveur NSCD-PDAS a été validé en simulant une collection de particules rigides est déposée dans un cylindre dont la paroi est en rotation avec une vitesse angulaire constante. Selon la vitesse de rotation et les propriétés mécaniques des particules (coefficients de restitution, loi de frottement), cet écoulement présente une déformation de la surface libre. La figure (5.10a) présente une capture de l'expérience réalisée avec des billes d'acier dans un tambour rotatif à 40 tours par minute. Les billes d'acier s'organisent

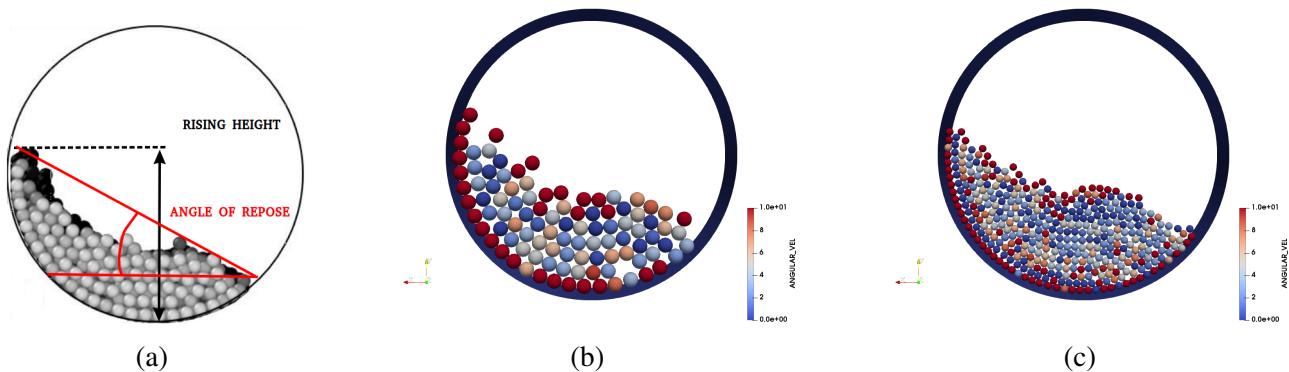


FIGURE 5.10 – Vues de perspective des simulations du tambour rotatif réalisées avec les méthodes PDAS (a) 100 billes d'acier, (b) 400 billes d'acier, 1600 billes d'acier lorsqu'un écoulement de surface régulier est atteint.

en couches : une couche en contact avec la paroi du tambour et le reste des billes sous forme de lit. Les figures (5.10b) et (5.10c) ont été obtenues par la méthode PDAS pour un milieu constitué de 100 et 400 particules. Nos simulations montrent que l'angle en régime établi est de 26° , ce qui est proche de celui observé expérimentalement par MAIONE et al. (2015). De plus les performances de notre approche NSCD-PDAS sont supérieures à celles de la méthode du bi-potentiel ou du Lagrangien augmenté : pour la configuration de 1600 billes, on observe une amélioration d'un facteur 2 minimums (cf. (ABIDE, MANSOURI et al., 2021)).

Éléments de comparaisons entre la DEM et la NSCD-PDAS. Une série de simulation a été réalisée pour comparer les méthodes NSCD-PDAS et l'approche DEM dans la configuration du tambour rotatif contenant 400 particules. La figure (5.11) montre un instantané du régime établi obtenu avec les modèles NCSD-PDAS et DEM-CUNDALL. La couleur des particules correspond à la distribution aléatoire des rayons de particules. Les deux approches donnent qualitativement le même résultat. Une analyse plus fine a été réalisée en mesurant l'interpénétration géométrique entre les particules. La figure (5.12) indique les niveaux d'interpénétration pour les deux approches NSCD-PDAS et DEM-CUNDALL. On observe une pénétration moyenne de l'ordre de 10^{-7} mètres sur quelques contacts avec l'approche NSCD. Avec la méthode DEM-CUNDALL, on relève une interpénétrabilité plus importante. Elle est de l'ordre de 10^{-6} mètres sur une bonne partie des contacts pour une constante de raideur normale (cf. Fig. 5.12a). C'est un résultat attendu puisque le modèle DEM-CUNDALL autorise l'interpénétration entre particules. Il est possible de réduire cette interpénétration en augmentant le coefficient de raider k_n (MAIONE et al., 2015), mais cela implique des pas temps très faibles mobilisant des ressources informatiques plus importantes.

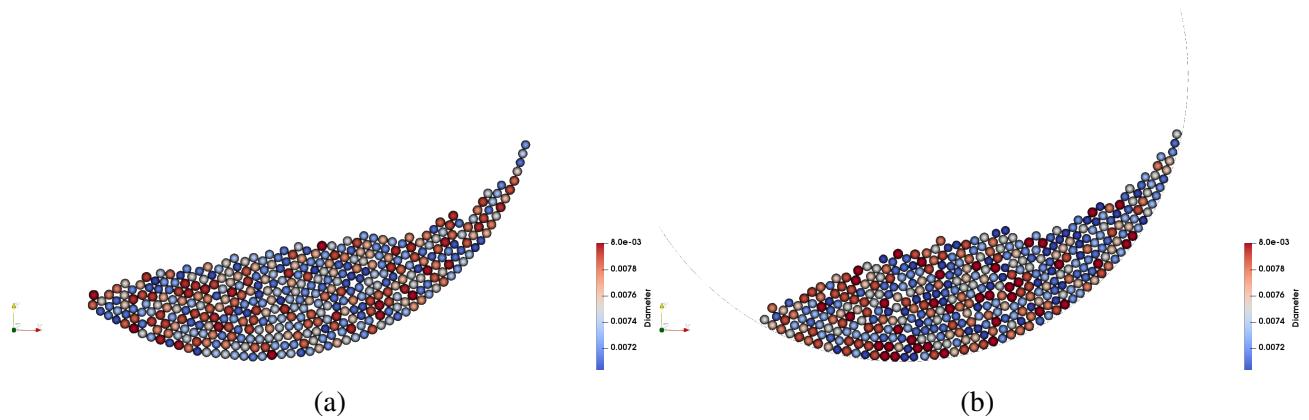


FIGURE 5.11 – Instantanés des profils d’écoulements granulaires dans un tambour rotatif à 400 particules de distribution aléatoire obtenus par (a) DEM-CUNDALL et (b) NSCD-PDAS en régime établi.

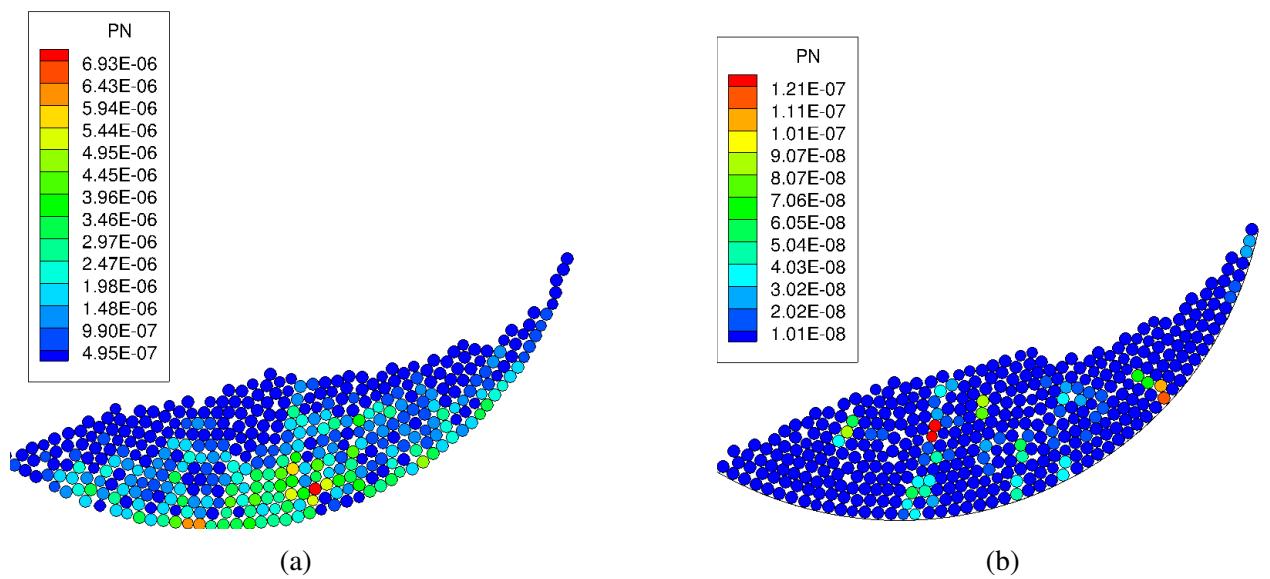


FIGURE 5.12 – Visualisation des interpénétrations lors des simulations d’écoulements granulaires dans un tambour rotatif à 400 particules de distribution aléatoire obtenues par (a) DEM-CUNDALL $k_n = 10^3 N.m^{-1}$, et (b) NSCD-PDAS.

Propriétés de conservation. L'une des propriétés les plus remarquables de la NSCD est son caractère conservatif. La figure (5.13) présente l'évolution temporelle de l'énergie cinétique pour le cas-test du tambour en rotation calculé à partir de la méthode DEM et NSCD-PDAS. On constate que le

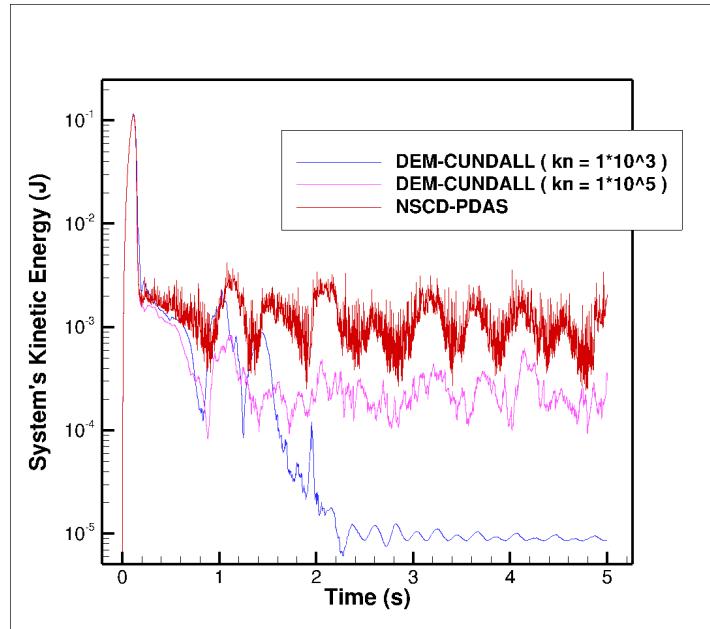


FIGURE 5.13 – Variations de l'énergie cinétique des simulations d'écoulements granulaires dans un tambour rotatif à 400 particules de distribution aléatoire au cours du temps obtenues par DEM-CUNDALL (pour différentes constantes de raideur normales k_n) et NSCD-PDAS.

niveau moyen d'énergie cinétique est dépendant du coefficient de raideur k_n . De faibles valeurs de k_n autorisent des pas d'intégration plus importants, mais sous-évaluent l'énergie du système. De valeurs de k_n plus importantes conduisent à une meilleure approximation du niveau d'énergie cinétique tendant vers celui de la méthode NSCD-PDAS. Le caractère conservatif de cette dernière est clairement illustré ici : il fournit le niveau d'énergie cinétique le plus élevé.

Calcul Haute Performance Le choix du framework MFIX-EXA ayant été motivé par son potentiel de parallélisation intéressant (MUSSER et al., 2022), l'implémentation de la NSCD-PDAS a été réalisée en intégrant cet aspect. La figure (5.14) présente une collection de plus de 16000 particules de diamètre compris entre 1 et 2 mm et distribués sur une grille de 64 processeurs. La parallélisation de MFIX-EXA

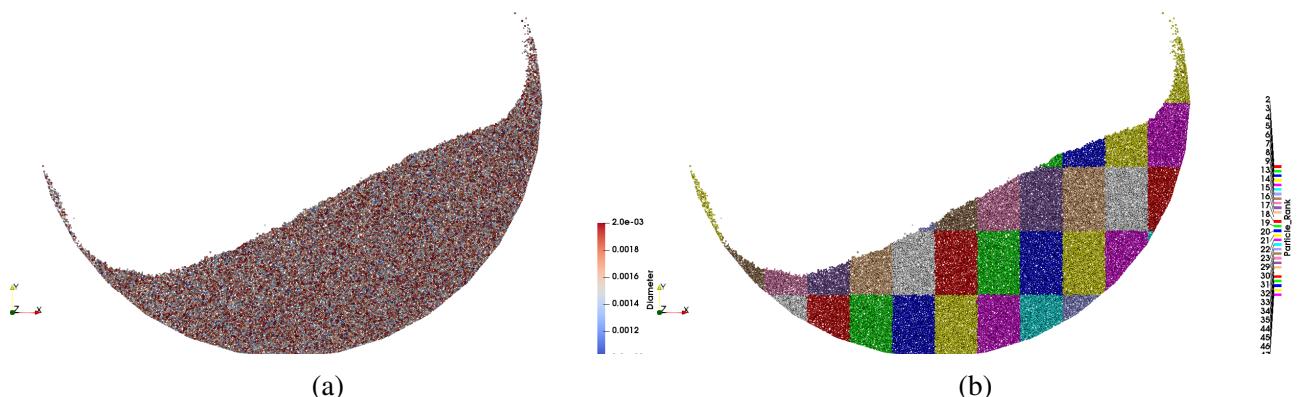


FIGURE 5.14 – Instantanées des profils d'écoulements granulaires dans un tambour rotatif à plus de 16000 particules NSCD-PDAS [(a) diamètre des particules (b) rang des processeurs].

(GARG et al., 2012) est basée sur une décomposition géométrique du domaine comme le montre la figure (5.14b). La scalabilité des deux approches NSCD-PDAS et DEM-CUNDALL est évaluée en évaluant le speedup et l'efficacité. Les tests de performances ont été obtenus sur le centre de calcul MESO@LR, sont basés sur une partition en 4, 8, 16, 32, 64 et 96 sous-domaines. Les résultats sont présentés figure 5.15. On note une rapide dégradation des performances qui résulte d'un mauvais

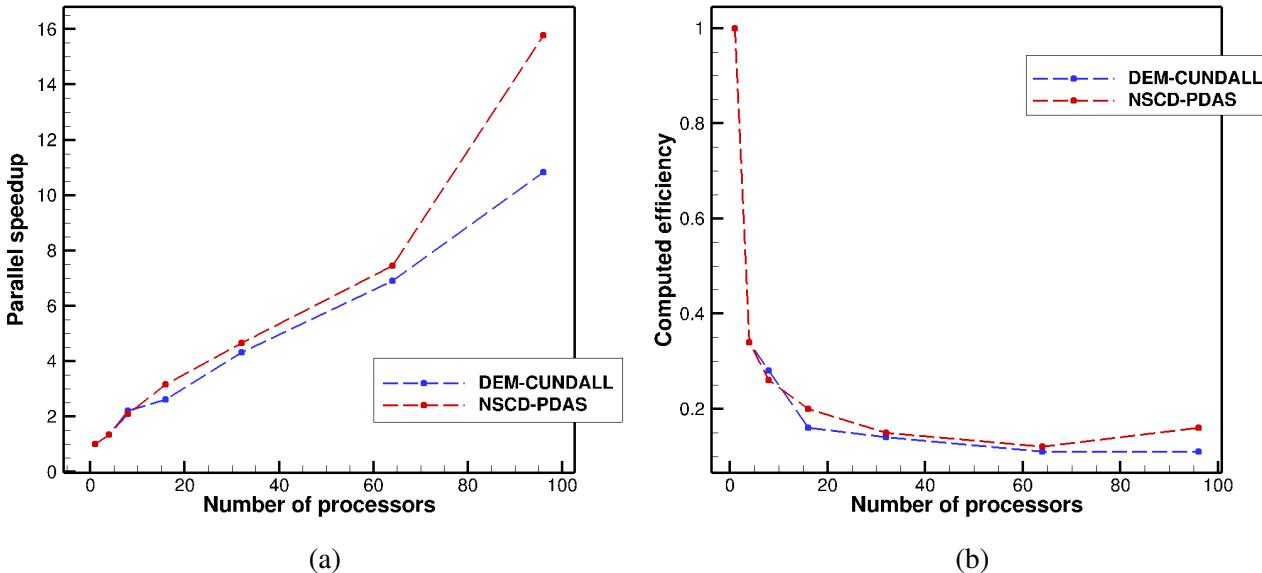


FIGURE 5.15 – Scalabilité obtenue par DEM-CUNDALL et NSCD-PDAS [(a) Speedup, (b) Efficacité en fonction du nombre de processeurs] mesurée à régime établi pour le système d'écoulement granulaire dans un tambour rotatif.

équilibrage des charges résultant de la sédimentation des particules. Ces courbes illustrent la limite de la décomposition géométrique de type cartésienne proposée par MFIX indépendamment de l'approche considérée DEM ou NSCD-PDAS.

Ces extraits de résultats montrent quelques propriétés effectives de la méthode NSCD-PDAS et des éléments de comparaison avec la méthode DEM bien établie dans la communauté des sciences de l'ingénieur. Bien que l'implémentation de la NSCD-PDAS soit plus complexe que celle de la DEM, la conservation de l'énergie où la très faible interpénétration géométrique en fait une méthode de référence pour la simulation des écoulements granulaires. La stabilité temporelle associée à la formulation implicite méthode est un aussi un élément remarquable qu'il convient d'exploiter notamment pour la simulation d'écoulement fluide chargé en particules.

5.3.3 Simulations préliminaires diphasique fluides/particules

Un des cadres applicatifs de la thèse de S. CHERKAOUI (2021) a été la simulation d'un lit fluidisé. L'objectif était de pouvoir tester le potentiel de l'approche NSCD-PDAS pour la simulation d'écoulements chargés en particule (CFD-NSCD). Pour cette étude, on s'est alors appuyée sur le logiciel MFIX-EXA qui intègre ce modèle avec l'approche DEM (CFD-DEM).

Modèles physiques d'écoulements chargés Le modèle physique constitutif des écoulements diphasiques fluide/solide dépend du régime d'écoulement autour des grains solides et de la charge en particules. La complexité de telles études réside en la combinaison du caractère multi-échelles inhérent à l'écoulement fluide, de la dynamique de contact des particules et des interactions avec la phase fluide. De fait il existe une hiérarchie de modèles pour le traitement de ces écoulements. Le modèle deux fluides "Two-Fluid Model" (TFM) de type Euler-Euler, présenté par GIDASPOW (1994) ou ENWALD et

al. (1996), permet de simuler les écoulements diphasiques fluides-particules. Une deuxième approche repose sur un modèle Euler-Lagrange. Introduite par TSUJI et al. (1993), cette approche consiste en un couplage de la méthode des éléments discrets pour la modélisation des particules et de l'approche eulérienne de la phase fluide (CFD-DEM). Dans ce cas, la phase solide est considérée comme un ensemble de particules interagissant avec la phase fluide continue selon une modélisation qui dépend de la charge en particules de l'écoulement. Ce dernier paramètre permet de préciser le modèle de couplage ; du fluide vers les particules (One-way coupling), fluide-particule réciproques (Two-way coupling) et fluide-particules réciproques ainsi que particules-particules (Four-way coupling). Dans le travail de thèse de S. Cherkaoui, la méthodologie NSCD-PDAS a été mise en œuvre avec MFIX-EXA selon le modèle d'interactions de type Four-way coupling. Le modèle mathématique de la phase fluide est celui de Navier-Stokes à densité variable et d'un terme d'échange de quantité de mouvement qui modélise l'action de la phase solide sur la phase fluide. Le modèle mathématique n'est pas reporté dans le manuscrit : le lecteur peut se référer aux documents de référence de MFIX (GARG et al., 2012) et pour l'intégration de la NSCD-PDAS à la thèse de S. CHERKAOUI (2021).

Dynamique de l'écoulement L'objectif de ce paragraphe est de donner un aperçu global de l'écoulement dans le lit fluidisé, indépendamment de l'approche utilisée. Pour cela, nous réalisons une simulation sur un temps d'intégration de 60 secondes, assez long pour pouvoir observer un régime établi où le lit est en perpétuel mouvement. Nous constatons alors que l'écoulement se met en mouvement et tend vers un régime stationnaire au bout de quelques secondes de simulation. Par ailleurs, en se basant sur une comparaison qualitative des champs dit "instantanés" de vitesses des particules correspondants à la phase de fluidisation du lit (cf. Fig. 5.16), on observe les mêmes écoulements à différents instants de la simulation, aussi bien pour la DEM que pour la NSCD. Ces séquences temporelles montrent par ailleurs une faible présence du fluide près des parois inférieures du conteneur, la concentration de particules y est beaucoup plus élevée. Un phénomène de re-circulation se met en place, puisque les particules tassées au fond du lit passent par le centre du lit par où le fluide est injecté, puis sont éjectées vers les bords.

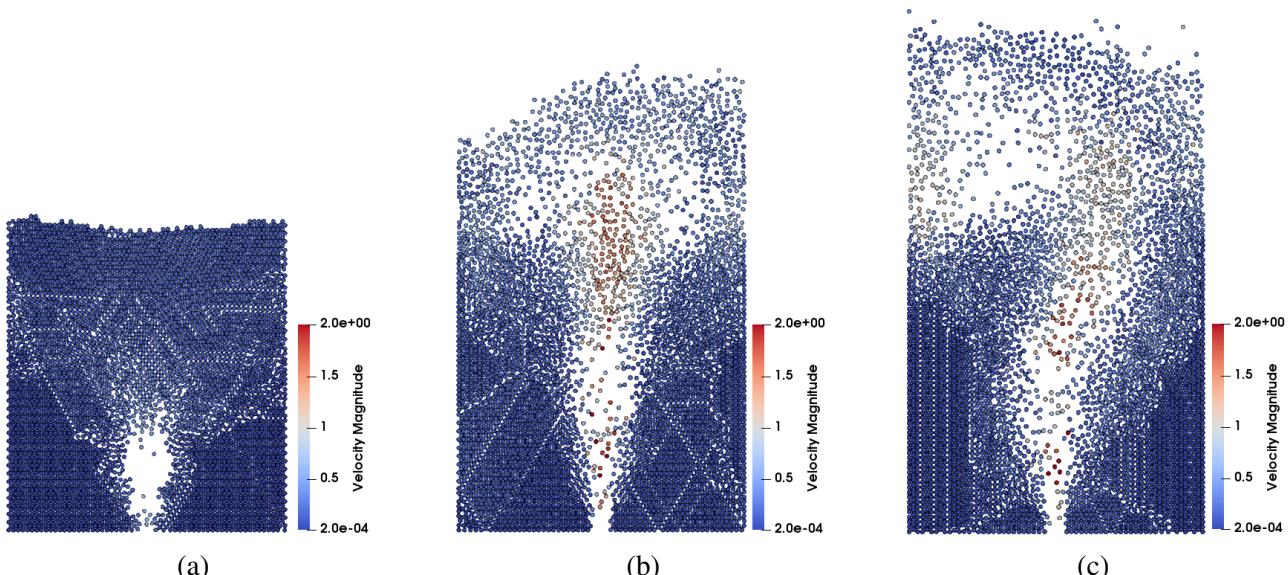


FIGURE 5.16 – Champs instantanés de la position des particules pour le lit fluidisé de Goldschmidt 0.5 s (à gauche), 1 s (au milieu) et 60 s (à droite) de simulation obtenues par NSCD-PDAS.

Comparaisons CFD-DEM / CFD-NSCD. Une discussion argumentée des performances de la NSCD-DEM a été réalisée par comparaison avec la CFD-DEM en utilisant l'environnement MFIX-EXA. La figure 5.17 présente l'évolution temporelle de la vitesse verticale à différentes hauteurs du lit fluidisé. Les fluctuations haute fréquence illustrent la forte instationnarité de l'écoulement, quel que

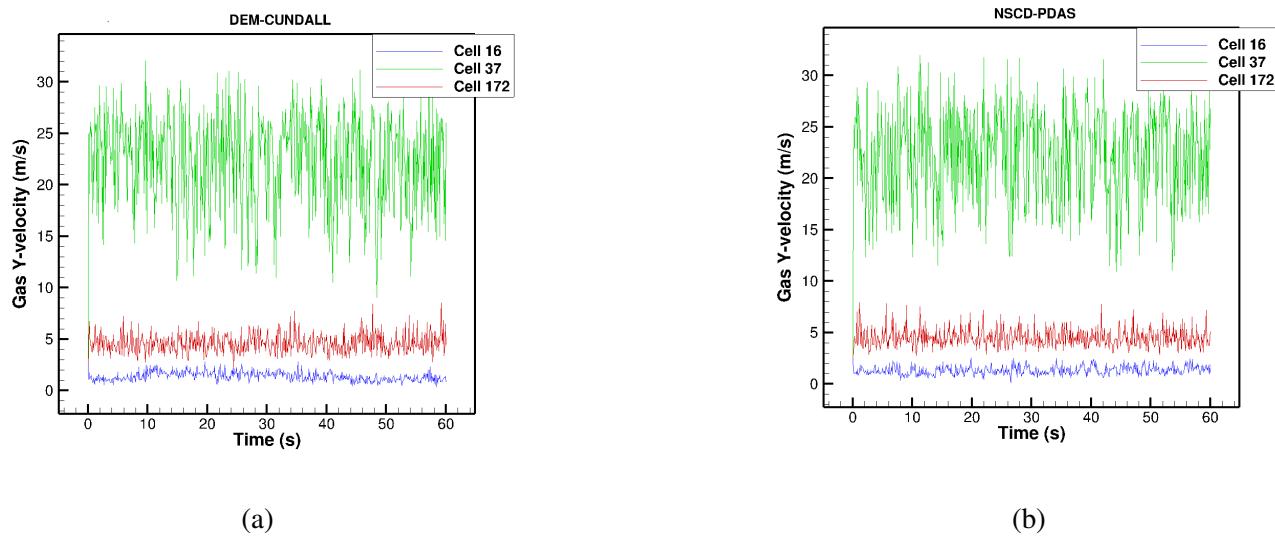


FIGURE 5.17 – Évolution de la vitesse d'écoulement du fluide au cours du temps dans différentes cellules du maillage fluide obtenues par (a) DEM-CUNDALL, (b) NSCD-PDAS pour le lit fluidisé de Goldschmidt.

soit le modèle utilisé. Nous observons une grande similarité entre le modèle DEM CUNDALL et al. (1979) et la NSCD que nous proposons. Le calcul des statistiques confirme cette observation. Les profils de la vitesse verticale moyenne pour différentes hauteurs $y = 0.1, 0.2$ et 0.3m sont reportés à la figure (5.18). Ces profils sont relativement similaires nous fournissons ainsi un élément de validation

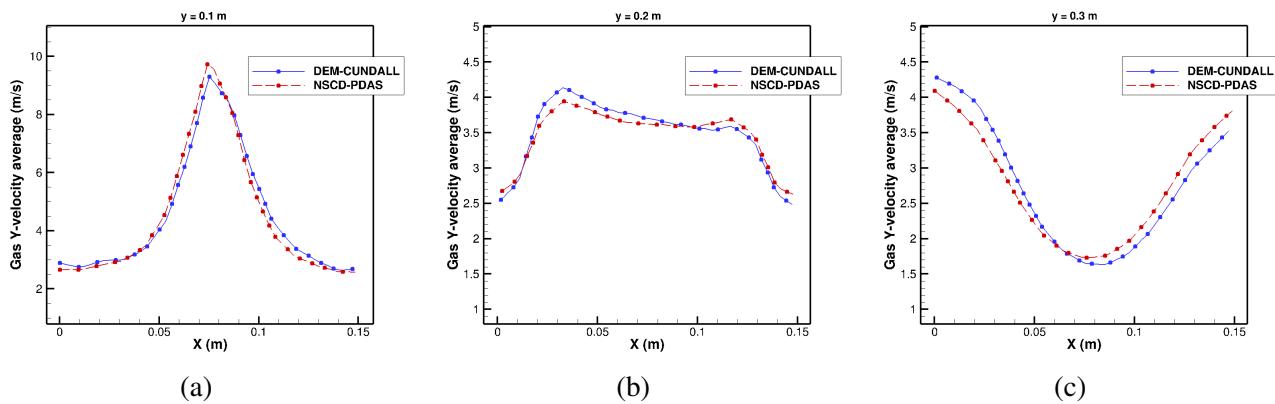


FIGURE 5.18 – Profils de vitesse d'écoulement du fluide moyennés dans le temps obtenus pour le lit fluidisé de Goldschmidt à différentes hauteurs. (a) 0.1m , (b) 0.2m , (c) 0.3m .

de notre approche NSCD-PDAS dans un contexte appliqué.

Sur le caractère implicite de la NSCD. L'une des propriétés remarquables de la NSCD est sa grande stabilité temporelle tout en garantissant la non-interpénétration géométrique. Nous avons mené des comparaisons en matière de temps de calcul entre les approches CFD-DEM et CFD-NSCD en simulant le lit fluidisé sur une durée de 60 s . Le modèle DEM est paramétrée constante des raideurs k_n (cf. sec. 5.3.2). Des constantes croissantes ont été considérées de k_n à 10^4 et 10^6 N.m^{-1} . On rappelle que le

modèle NSCD-PDAS peut être vu comme la limite de la DEM avec une valeur *infinie* de la constante de raideur. Pour toutes les simulations réalisées le pas de temps du schéma temporel des particules est constant : $dt_{solide} = 5 \times 10^{-4} s$). Pour l'approche DEM-CUNDALL, la variation de la constante de raideur k_n nécessite d'adapter le pas de temps pour garantir la stabilité temporelle. A titre indicatif, pour $k_n = 10^6 N.m^{-1}$, le pas de temps est de l'ordre de $dt_{solide} = 1 \times 10^{-5} s$, soit plus d'un ordre de grandeur. Dans la table (5.1), nous fournissons les temps CPU totaux fluide et solide pour chaque simulation. On constate que les temps CPU sont équivalents si l'on choisit $k_n = 2519 N.m^{-1}$ mais

Approche de contact	Temps CPU total fluide (s)	Temps CPU total solide (s)
DEM-CUNDALL ($k_n = 2519 N.m^{-1}$)	3019	20050
DEM-CUNDALL ($k_n = 10^4 N.m^{-1}$)	3033	38230
DEM-CUNDALL ($k_n = 10^6 N.m^{-1}$)	3054	346103
NSCD-PDAS ($dt_{solide} = 1 \times 10^{-4} s$)	3039	132081
NSCD-PDAS ($dt_{solide} = 5 \times 10^{-4} s$)	3022	21302

TABLE 5.1 – Temps CPU totaux fluide et solide pour simuler le lit de Goldschmidt selon l'approche de contact.

avec une interpénétration possiblement élevée (cf. section 5.3.2). Si on privilégie une interpénétration faible, alors le choix de $k_n = 10^6 N.m^{-1}$ est indiqué mais il conduit à un temps de calcul supérieur d'un facteur 15 à la NSCD-PDAS.

5.4 Conclusions et perspectives

Ce chapitre présente une synthèse détaillée de mon activité scientifique et d'encadrement sur une thématique en mécanique du contact. Le point central est le traitement numérique de la condition unilatérale inhérent à la formulation de problème de contact mécanique ou transferts thermiques avec changement de phase. Nous avons abordé cette condition, aussi dite de Signorini, sous l'angle d'une équation de complémentarité à résoudre. La méthode de Newton semi-lisse s'est avérée offrir un cadre théorique pour la convergence et cadre méthodologique pratique. Premièrement, nous avons pu traiter des problèmes en mécanique du contact couvrant la mécanique des milieux déformables et les écoulements granulaires.

Il me semble avoir établi des liens avec mes activités principales en mécanique des fluides numériques et les schémas compacts. Ceci est étayé par deux conclusions qui me paraissent intéressantes pour ouvrir de nouvelles perspectives. Premièrement, nous avons constaté que le manque de régularité des solutions sujettes à une condition unilatérale ne dégradait que localement la précision des schémas compacts. Cela laisse entrevoir de nouvelles investigations pour les schémas compacts en mécaniques des milieux déformables avec contact.

Le deuxième point intéressant est le retour d'expérience sur le couplage CFD-NSCD. On ne dénombre que peu de travaux d'un tel couplage, qui plus est en dimension 2. Les simulations réalisées avec S. CHERKAOUI (2021) montrent clairement le bénéfice en matière de temps cpu. Un axe de poursuite de travaux serait naturellement l'extension de ce type de couplage aux solveurs fluide tel que présentés au chapitre 3.

CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

Ma contribution la plus significative réside certainement dans la mise en oeuvre des schémas compacts dans le cadre de la modélisation numérique des écoulements. La démarche scientifique qui a guidé mon activité de recherche a par conséquent consisté en l'élaboration d'un code à *vocation généraliste* original (du type LES/DNS). L'idée directrice de l'ensemble de mes travaux a reposé sur une correcte exploitation du caractère local des schémas compacts.

Ce caractère, que je qualifie de "quasi-local", est discuté au chapitre 2 de ce manuscrit. Sur la base de mon expérience, je discute de l'origine de la perte du caractère local des schémas compacts lors de la discrétisation des problèmes elliptiques. Plusieurs techniques ont été mises en oeuvre dans le but de répondre le plus efficacement possible à ce point précis.

Ainsi dans le chapitre 3, je présente mes contributions méthodologiques. Je met en évidence la pertinence de l'approche rPDD afin d'exploiter le caractère local des schémas compacts dans le cadre des solveurs incompressibles. J'y propose également une technique de parallélisation de la méthode de diagonalisations successives pour les problèmes elliptiques séparables. Bien que n'exploitant pas la localité des schémas compacts, elle reste suffisamment performante pour réaliser en un temps raisonnable des simulations d'écoulements multi-échelles. Par ailleurs, une alternative basée sur le préconditionnement de bas ordre est proposée et discutée dans ce chapitre.

Il n'en demeure pas moins, qu'en utilisant la combinaison rPDD et la méthode de diagonalisation, il nous est possible de réaliser des simulations LES et DNS pour des configurations cartésiennes et cylindriques. Ces points sont abordés dans le chapitre 4. J'y résume mes contributions aux thématiques des écoulements confinés anisothermes, et plus récemment sur les écoulements stratifiés soumis à la rotation dans le cadre de mes collaborations nationales et internationales. Cette dernière thématique me paraît illustrer la pertinence de ma démarche. Les limitations informatiques (en terme de coûts de calcul et de souplesse) permettent de conforter les choix de mes futures directions de recherche.

Le dernier chapitre résume ma collaboration avec la composante de mathématiques de notre laboratoire traitant de la mécanique du contact. Les applications visées sont par exemple, les écoulements granulaires, le contact entre un solide déformable et une fondation rigide. J'y présente aussi des travaux en lien avec mes activités de recherche sur les schémas compacts ainsi qu'un travail exploratoire sur les matériaux à changement de phase *surfacique*.

Les perspectives que je propose sont dans la continuité de cette démarche scientifique : contributions méthodologiques exploitant la nature locale des schémas compacts, définition d'un cadre applicatif afin d'évaluer l'efficacité de ces dernières. Je décline ci-dessous les perspectives selon le

thème considéré.

Schémas compacts. La démarche que je propose dans le but d'exploiter le caractère local des schémas compacts me semble indiquer la stratégie à suivre quant au traitement des problèmes elliptiques. Il apparaît que le préconditionnement de bas ordre reste efficace et pourrait ouvrir des perspectives tant pour le calcul haute performance que pour le traitement de problèmes à coefficient variable ou en géométrie complexe. Les travaux en cours visent dans l'immédiat à déterminer le point d'"inversion" entre le préconditionnement et la méthode de diagonalisations successives. Le point d'inversion est la taille du maillage pour lequel le temps cpu du préconditionnement sera inférieur à celui de la diagonalisation. Cette information déterminée dans un contexte applicatif (canal turbulent incompressible, cavité barocline,...) fournira un point de repère pour la recherche de préconditionneurs plus performants tels que des préconditionneurs de type multiblocs. La formulation implicite d'opérateurs hyper-diffusifs (LAMBALLAIS et al., 2021) pourrait également constituer une perspective intéressante. La souplesse et la robustesse du préconditionnement de bas ordre pourraient contribuer à étendre le domaine d'application des schémas compacts.

Problèmes non-réguliers. Ce travail collaboratif sur la thématique de la mécanique du contact m'a permis d'acquérir une méthodologie pour une classe de modèles non-réguliers. Cette spécificité devrait permettre d'ouvrir un nouveau champ d'application des schémas compacts. L'étude du problème non-régulier de Poisson avec une condition de Signorini, discrétisé par schémas compacts pourrait permettre une résolution efficace des problèmes en élastodynamique avec contact. Les tests préliminaires de couplage fluide/particules se sont révélés particulièrement convaincants car la contrainte de stabilité temporelle de la phase solide peut être relaxée dans le contexte de la NSCD. Signalons qu'il existe peu de travaux avec un couplage fluide/particules incluant l'approche NSCD. On citera par exemple les travaux de DBOUK et al. (2016) qui proposent un tel couplage fluide/solide basé sur une approche dite à frontières immergées proposée initialement par LAIZET et al. (2009) dans le cadre des schémas compacts. Ce nouvel axe de recherche pourrait trouver un cadre applicatif pour les applications de type solaire concentré, où la phase solide est considérée comme un vecteur énergétique.

Calcul Haute Performance. Désormais indissociable des activités en simulation, le calcul haute performance est à considérer dès la conception d'un solveur Navier-Stokes basé sur des méthodes d'ordre élevé. L'essor des architectures hybrides CPU-Cores/GPU¹ et les temps d'accès mémoire rendent cruciale la localité en mémoire des données. Ceci est un des points clefs quant à la mise en oeuvre adéquate des schémas compacts permettant de combiner précision et calcul haute performance. A court terme, des stratégies simples peuvent être développées afin d'accélérer les solveurs actuels via l'hybridation MPI/OpenMp. C'est une procédure technique qui a pour finalité de réduire le volume des communications. De même, les préconditionnements par précision mixte (simple précision) sont des pistes à explorer en vue de réduire les temps de restitution des simulations.

Ces aspects méthodologiques restent légitimes, s'ils contribuent à une problématique d'intérêt. Cela a été une difficulté clairement identifiée durant mes premiers encadrements de thèse. L'établissement des collaborations établies avec l'équipe de AMU/M2P2 et U. Harlander (BTU/LAS) me semble être incontournable compte tenu du contexte de mes activités de recherche. Cela me permet ainsi de constituer une sélection d'écoulements de référence avec une problématique numérique clairement identifiée.

Simulations numériques d'écoulements. Les ondes d'inertie gravité jouent un rôle important dans la dynamique des transferts de l'atmosphère. Ces régimes peuvent être atteints en laboratoire qu'avec

1. <https://www.top500.org/>

des cavités baroclines de grand rapport de forme, induisant du point de vue numérique des simulations massives en terme de temps de calcul et mémoire, qui sont à l'heure actuelle hors de portée. Mes contributions méthodologiques dans le cadre des schémas compacts pourraient constituer une approche prometteuse à cette problématique. Par ailleurs, la technique de préconditionnement de bas ordre devrait permettre de prendre en compte le modèle alternatif proposé par WRIGHT et al. (2017) qui consiste à imposer des conditions aux limites de nature différente à la surface libre de la cavité barocline.

Le domaine d'étude des écoulements faiblement compressibles est également un volet des mes activités de recherche que je souhaite développer. Mes travaux sur les solveurs elliptiques à coefficients variables entrent naturellement dans ce cadre. Des échanges avec le laboratoire PROMES concernant la turbulence de canal en présence d'un fort gradient de température devraient me permettre de confirmer l'utilisation des schémas d'ordre élevé dans un contexte de modélisation complexe lié au solaire à concentration.

En conclusion, il me semble que l'importance des discrétisations d'ordre élevé dans notre communauté de la simulation numérique des écoulements dépend fortement des interactions entre méthodes numériques et architecture des infrastructures de calcul haute performance. C'est dans cette direction que je souhaite poursuivre mes futures activités de recherche.

BIBLIOGRAPHIE

- ABIDE, S., BINOUS, M. & ZEGHMATI, B. (2017). An efficient parallel high-order compact scheme for the 3D incompressible Navier–Stokes equations. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, 31(4-5).
- ABIDE, S., MANSOURI, W., CHERKAOUI, S. & CHENG, X. (2021). High-order compact scheme finite difference discretization for Signorini's problem. *International Journal of Computer Mathematics*, 98(3), 580-591.
- ABIDE, S. & ZEGHMATI, B. (2017). Multigrid defect correction and fourth-order compact scheme for Poisson's equation. *Computers and Mathematics with Applications*, 73(7).
- ABIDE, S. (2020). Finite Difference preconditioning for compact scheme discretizations of the Poisson equation with variable coefficients. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 379, 112872.
- ABIDE, S., BARBOTEU, M., CHERKAOUI, S., DANAN, D. & DUMONT, S. (2021). Inexact primal–dual active set method for solving elastodynamic frictional contact problems. *Computers & Mathematics with Applications*, 82, 36-59.
- ABIDE, S., BARBOTEU, M., CHERKAOUI, S. & DUMONT, S. (2021). A semi-smooth Newton and Primal–Dual Active Set method for Non-Smooth Contact Dynamics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 387, 114153.
- ABIDE, S. & VIAZZO, S. (2005). A 2D compact fourth-order projection decomposition method. *Journal of Computational Physics*, 206(1), 252-276.
- ABIDE, S. & CARO, F. (2007). *Maquette solveur volumes finis multi-physique* (rapp. tech.). Tech. Report SFME/MTMS/RT/07-005/B, CEA, DEN/DM2S.
- ABIDE, S., VIAZZO, S. & SOLLIEC, C. (2009). Simulation numérique du refroidissement d'une plaque plane par un jet plan impactant. Société Française de Thermique, Vannes - France, June 2009.
- ABIDE, S., CHESNEAU, X. & ZEGHMATI, B. (2012). Compact mixed methods for convection/diffusion type problems. *Applied Mathematics and Computation*, 218(10), 5867-5876.
- ABIDE, S., CHESNEAU, X. & ZEGHMATI, B. (2013). A Fourth-Order Iterative Solver for the Singular Poisson Equation. In *Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics)* (p. 143-150).
- ABIDE, S., BARBOTEU, M. & DANAN, D. (2016). Analysis of two active set type methods to solve unilateral contact problems. *Applied Mathematics and Computation*, 284, 286-307.
- ABIDE, S., VIAZZO, S., RASPO, I. & RANDRIAMAMPIANINA, A. (2018). Higher-order compact scheme for high-performance computing of stratified rotating flows. *Computers and Fluids*, 174, 300-310.
- ABIDE, S., BARBOTEU, M., CHERKAOUI, S., DANAN, D. & DUMONT, S. (accepted). Unified Primal–Dual Active Set Method for dynamic frictional contact problems. *Fixed Point Theory and Applications*.

- ACHATZ, U., BORCHERT, S., FRUMAN, M., HIEN, S. & ROLLAND, J. (2015). Gravity wave emission in an atmosphere-like configuration of the differentially heated rotating annulus experiment, In *APS Division of Fluid Dynamics Meeting Abstracts*.
- ADAMS, N. A. & SHARIFF, K. (1996). A high-resolution hybrid compact-eno scheme for shock-turbulence interaction problems. *Journal of Computational Physics*, 127(1), 27-51.
- AITCHISON, J., ELLIOTT, C. & OCKENDON, J. (1983). Percolation in gently sloping beaches. *IMA journal of applied mathematics*, 30(3), 269-287.
- AITCHISON, J., LACEY, A. & SHILLOR, M. (1984). A model for an electropaint process. *IMA journal of applied mathematics*, 33(1), 17-31.
- AITCHISON, J. & POOLE, M. (1998). A numerical algorithm for the solution of Signorini problems. *Journal of Computational and Applied mathematics*, 94(1), 55-67.
- ALART, P. & CURNIER, A. (1991). A mixed formulation for frictional contact problems prone to Newton like solution methods. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 92(3), 353-375.
- ALIZARD, F., ROBINET, J. C. & GLOERFELT, X. (2012). A domain decomposition matrix-free method for global linear stability. *Computers and Fluids*, 66, 63-84.
- ARNOLD, D. N., BREZZI, F., COCKBURN, B. & MARINI, L. D. (2002). Unified Analysis of Discontinuous Galerkin Methods for Elliptic Problems. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 39(5), 1749-1779.
- AUZINGER, W. & STETTER, H. J. (1982). Defect corrections and multigrid iterations, 327-351.
- BARTHOLOMEW, P., DESKOS, G., FRANTZ, R. A., SCHUCH, F. N., LAMBALLAIS, E. & LAIZET, S. (2020). Xcompact3D: An open-source framework for solving turbulence problems on a Cartesian mesh. *SoftwareX*, 12, 100550.
- BERGOUNIOUX, M., ITO, K. & KUNISCH, K. (1999). Primal-dual strategy for constrained optimal control problems. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 37(4), 1176-1194.
- BETTS, P. L. & BOKHARI, I. H. (2000). Experiments on turbulent natural convection in an enclosed tall cavity. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 21(6), 675-683.
- BINOUS, M. S. (2017). *Simulations numériques d'écoulements anisothermes turbulents: application à la cavité ventilée* (thèse de doct.). Université de Perpignan Via Domitia.
- BINOUS, M. S., ABIDE, S., ZEGHMATI, B. & HASSIS, H. (2016). 3D Incompressible Turbulent Flow in a Parallelipipedic Cavity. *Machine Dynamics Research*, 40(2), 5-18.
- BLOCKEN, B. (2018). LES over RANS in building simulation for outdoor and indoor applications: A foregone conclusion? *Building Simulation*, 11(5), 821-870.
- BOERSMA, B. J. (2011). A 6th order staggered compact finite difference method for the incompressible Navier–Stokes and scalar transport equations. *Journal of Computational Physics*, 230(12), 4940-4954.
- BROWN, D. L., CORTEZ, R. & MINION, M. L. (2001). Accurate Projection Methods for the Incompressible Navier–Stokes Equations. *Journal of Computational Physics*, 168(2), 464-499.
- CANUTO, C., HUSSAINI, M. Y., QUARTERONI, A., THOMAS JR, A. et al. (2012). *Spectral methods in fluid dynamics*. Springer Science & Business Media.
- CAREY, G. F. & SPOTZ, W. F. (1997). Higher-order compact mixed methods. *Communications in Numerical Methods in Engineering*, 13(7), 553-564.
- CASCAVITA, K. L., CHOULY, F. & ERN, A. (2020). Hybrid High-Order discretizations combined with Nitsche's method for Dirichlet and Signorini boundary conditions. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 40(4), 2189-2226.
- CHABANI, O., ABIDE, S., LAMROUS, N. & ZEGHMATI, B. (2017). Numerical study of non-Boussinesq convection in a ventilated cavity. *Computational Thermal Sciences: An International Journal*, 9(2), 135-149.

- CHABANI, O., ABIDE, S., LAMROUS, N. & ZEGHMATI, B. (2015). Simulation numérique de la convection thermosolutale non-Boussinesq dans une cavité carrée, In *22ème Congrès Français de Mécanique*.
- CHEN, Q. & VAN DER KOOI, J. (1990). A methodology for indoor airflow computations and energy analysis for a displacement ventilation system. *Energy and Buildings*, 14(4), 259-271.
- CHERKAOUI, S. (2021). *Résolution de problèmes multi-contacts: méthodes et applications* (thèse de doct.). Perpignan de Perpignan Via Domitia.
- CHESNEAU, X., ABIDE, S. & ZEGHMATI, B. (2011). Turbulent Mixed Convection Inside a Vertical Tube With Wetted Wall. *Journal of Heat Transfer*, 133(10), 101503.
- CIMENT, M., LEVENTHAL, S. H. & WEINBERG, B. C. (1978). The operator compact implicit method for parabolic equations. *Journal of Computational Physics*, 28(2), 135-166
- OCI compact scheme based on operator compact implicit.
- CLAUS, S. & KERFRIDEN, P. (2019). A CutFEM method for two-phase flow problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 348, 185-206.
- COLLATZ, L. (1960). *The Numerical Treatment of Differential Equations* (T. 53). Berlin, Heidelberg, Springer Berlin Heidelberg.
- COOPER, D., CRAFT, T. J., ESTEIFI, K. & IACOVIDES, H. (2012). Experimental investigation of buoyant flows in inclined differentially heated cavities. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 55(23-24), 6321-6339.
- COUDIÈRE, Y., VILA, J.-P. & VILLEDIEU, P. (1999). Convergence rate of a finite volume scheme for a two dimensional convection-diffusion problem. *ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 33(3), 493-516.
- CROISILLE, J. P. (2013). Hermitian compact interpolation on the cubed-sphere grid. *Journal of Scientific Computing*, 57(1), 193-212.
- CUNDALL, P. A. & STRACK, O. D. (1979). A discrete numerical model for granular assemblies. *geotechnique*, 29(1), 47-65.
- DAIRAY, T., LAMBALLAIS, E., LAIZET, S. & VASSILICOS, J. C. (2017). Numerical dissipation vs. subgrid-scale modelling for large eddy simulation. *Journal of Computational Physics*, 337, 252-274.
- DANAN, D. (2016). *Modélisation, analyse et simulations numériques de quelques problèmes de contact* (thèse de doct.). Université de Perpignan Via Domitia.
- DBOUK, T., PERALES, F., BABIK, F. & MOZUL, R. (2016). A DF-IBM/NSCD coupling framework to simulate immersed particle interactions. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 309, 610-624.
- DEROUICH, Y., NASRI, Z., ABIDE, S. & LAATAR, A. (2018). Inclination effects on heat transfer by an oscillating square cylinder in channel flow. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 125.
- DOUKKALI, H., ABIDE, S., LHASSANE LAHLAOUTI, M. & KHAMLICHI, A. (2018). Large Eddy Simulation of turbulent natural convection in an inclined tall cavity. *Numerical Heat Transfer; Part A: Applications*, 74(4).
- DOUKKALI, H. (2021). *Modélisation bidimensionnelle de l'évaporation/condensation dans une enceinte de dessalement solaire*. (thèse de doct.). Université de Tétouan.
- DUBOIS, F., ACARY, V. & JEAN, M. (2018). The Contact Dynamics method: A nonsmooth story. *Comptes Rendus Mécanique*, 346(3), 247-262.
- DUBRULLE, B., DAUCHOT, O., DAVIAUD, F., LONGARETTI, P. Y., RICHARD, D. & ZAHN, J. P. (2005). Stability and turbulent transport in Taylor-Couette flow from analysis of experimental data. *Physics of Fluids*, 17(9), 1-19.
- DUCROS, F., NICoud, F. & POINSOT, T. (1998). Wall-adapting local eddy-viscosity models for simulations in complex geometries. *Numerical Methods for Fluid Dynamics VI*, 293-299.
- DUVAUT, G. (1972). Les inéquations en mécanique et en physique. Dunod.

- EMMERICH, S. J. & MCGRATTAN, K. B. (1998). Application of a large eddy simulation model to study room airflow. *ASHRAE Transactions*, 104(Pt 1B), 1128-1140.
- ENWALD, H., PEIRANO, E. & ALMSTEDT, A.-E. (1996). Eulerian two-phase flow theory applied to fluidization. *International Journal of Multiphase Flow*, 22, 21-66.
- EZZOUEHRI, R., JOUBERT, P., PENOT, F. & MERGUI, S. (2009). Large Eddy simulation of turbulent mixed convection in a 3D ventilated cavity: Comparison with existing data. *International Journal of Thermal Sciences*, 48(11), 2017-2024.
- FAUGARET, A., DUGUET, Y., FRAIGNEAU, Y. & WITKOWSKI, L. M. (2020). Influence of interface pollution on the linear stability of a rotating flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 900.
- FERZIGER, J. H. & PERIĆ, M. (2002). *Computational Methods for Fluid Dynamics* (Springer-V, T. 0000). Springer.
- FONTAINE, G., PONCET, S. & SERRE, E. (2014). Multidomain extension of a pseudospectral algorithm for the direct simulation of wall-confined rotating flows. *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, 95, 261-271.
- FOURNIÉ, M. & KARAA, S. (2006). Iterative methods and high-order difference schemes for 2D elliptic problems with mixed derivative. *Journal of Applied Mathematics and Computing*, 22(3), 349-363.
- GARG, R., GALVIN, J., LI, T. & PANNALA, S. (2012). Documentation of open-source MFIX-DEM software for gas–solids flows. *From URL https://mfix.netl.doe.gov/download/mfix/mfix_current_documentation_1.pdf*.
- GIDASPOW, D. (1994). *Multiphase flow and fluidization: continuum and kinetic theory descriptions*. Academic press.
- HALDENWANG, P., LABROSSE, G., ABBOUDI, S. & DEVILLE, M. (1984). Chebyshev 3-D spectral and 2-D pseudospectral solvers for the Helmholtz equation. *Journal of Computational Physics*, 55(1), 115-128.
- HAMMOU, Z. A., BENHAMOU, B., GALANIS, N. & ORFI, J. (2004). Laminar mixed convection of humid air in a vertical channel with evaporation or condensation at the wall. *International Journal of Thermal Sciences*, 43(6), 531-539.
- HIDE, R. (1967). Theory of axisymmetric thermal convection in a rotating fluid annulus. *The Physics of Fluids*, 10(1), 56-68.
- HIEN, S., ROLLAND, J., BORCHERT, S., SCHOON, L., ZÜLICKE, C. & ACHATZ, U. (2018). Spontaneous inertia–gravity wave emission in the differentially heated rotating annulus experiment. *Journal of Fluid Mechanics*, 838, 5-41.
- HINTERMÜLLER, M., ITO, K. & KUNISCH, K. (2002). The primal-dual active set strategy as a semismooth Newton method. *SIAM Journal on Optimization*, 13(3), 865-888.
- HIXON, R. (2000). Prefactored Small-Stencil Compact Schemes. *Journal of Computational Physics*, 165(2), 522-541.
- HOKPUNNA, A. & MANHART, M. (2010). Compact fourth-order finite volume method for numerical solutions of Navier–Stokes equations on staggered grids. *Journal of Computational Physics*, 229(20), 7545-7570
Equation de pression pressure solver not understand Misc. compare 4th and 2nd-order turbulent channel spectra Pressure equation complicated to handle.
- JANG, J. H., YAN, W. M. & HUANG, C. C. (2005). Mixed convection heat transfer enhancement through film evaporation in inclined square ducts. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 48(11), 2117-2125.
- JIANG, G.-S. & SHU, C.-W. (1996). Efficient Implementation of Weighted ENO Schemes. *Journal of Computational Physics*, 126(1), 202-228.
- KARAA, S. & ZHANG, J. (2002). Convergence and performance of iterative methods for solving variable coefficient convection-diffusion equation with a fourth-order compact difference scheme. *Computers & Mathematics with Applications*, 44(3-4), 457-479.

- KHERBACHE, K., CHESNEAU, X., ZEGHMATI, B., ABIDE, S. & BENMAMAR, S. (2017). The effects of step inclination and air injection on the water flow in a stepped spillway: A numerical study. *Journal of Hydrodynamics*, 29(2).
- KIM, J. W. & SANDBERG, R. D. (2012). Efficient parallel computing with a compact finite difference scheme. *Computers and Fluids*, 58, 70-87.
- KLEIN, M., SADIKI, A. & JANICKA, J. (2003). A digital filter based generation of inflow data for spatially developing direct numerical or large eddy simulations. *Journal of Computational Physics*, 186(2), 652-665.
- KNIKKER, R. (2009). Study of a staggered fourth-order compact scheme for unsteady incompressible viscous flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 59(10), 1063-1092.
- KNIKKER, R. (2011). A comparative study of high-order variable-property segregated algorithms for unsteady low Mach number flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 66(February 2010), 403-427
Low mach.
- KRAUSE, E., HIRSCHEL, E. & KORDULLA, W. (1976). Fourth order "mehrstellen"-integration for three-dimensional turbulent boundary layers. *Computers & Fluids*, 4(2), 77-92.
- KRAUSE, M. J., KUMMERLÄNDER, A., AVIS, S. J., KUSUMAATMAJA, H., DAPELO, D., KLEMENS, F., GAEDTKE, M., HAFEN, N., MINK, A., TRUNK, R. et al. (2021). OpenLB—Open source lattice Boltzmann code. *Computers & Mathematics with Applications*, 81, 258-288.
- KUMAR, A. & RAY, R. K. (2020). Theoretical understanding of unsteady flow separation for shear flow past three square cylinders in vee shape using structural bifurcation analysis. *Computational and Applied Mathematics*, 39(3), 177.
- LABROSSE, G. & REDONDO, A. (2011). The optimal 3-node preconditioner of the d2dx2 Fourier and Chebyshev spectral operators. *Journal of Computational Physics*, 230(1), 147-158.
- LAGE, J. & BEJAN, A. (1993). The resonance of natural convection in an enclosure heated periodically from the side. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 36(8), 2027-2038.
- LAI, M.-C. & TSENG, J.-M. (2007). A formally fourth-order accurate compact scheme for 3D Poisson equation in cylindrical coordinates. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 201(1), 175-181.
- LAIZET, S. & LAMBALLAIS, E. (2009). High-order compact schemes for incompressible flows : A simple and efficient method with quasi-spectral accuracy. *Journal of Computational Physics*, 228(16), 5989-6015.
- LAIZET, S. & LI, N. (2011). Incompact3d: A powerful tool to tackle turbulence problems with up to $O(10^5)$ computational cores. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 67(11), 1735-1757.
- LAMBALLAIS, E., CRUZ, R. V. & PERRIN, R. (2021). Viscous and hyperviscous filtering for direct and large-eddy simulation. *Journal of Computational Physics*, 431, 110115.
- LE BARS, M. & LE GAL, P. (2007). Experimental analysis of the stratorotational instability in a cylindrical couette flow. *Physical Review Letters*, 99(6), 1-4.
- LE POTIER, C. (2005). Schéma volumes finis pour des opérateurs de diffusion fortement anisotropes sur des maillages non structurés. *Comptes Rendus Mathematique*, 340(12), 921-926.
- LECOINTE, Y. & PIQUET, J. (1984). On the use of several compact methods for the study of unsteady incompressible viscous flow round a circular cylinder. *Computers & Fluids*, 12(4), 255-280.
- LELE, S. K. (1992). Compact finite difference schemes with spectral-like resolution. *Journal of Computational Physics*, 103(1), 16-42.
- LI, N. & LAIZET, S. (2010). 2DECOMP & FFT-A Highly Scalable 2D Decomposition Library and FFT Interface. *Cray User Group 2010 conference*, 1-13.
- LI, X. & DONG, H. (2019). Analysis of the element-free Galerkin method for Signorini problems. *Applied Mathematics and Computation*, 346, 41-56.

- LIMANE, A., FELLOUAH, H. & GALANIS, N. (2015). Thermo-ventilation study by OpenFOAM of the airflow in a cavity with heated floor. *Building Simulation*, 8(3), 271-283.
- LOPEZ, J. M., FELDMANN, D., RAMPP, M., VELA-MARTIN, A., SHI, L. & AVILA, M. (2020). nsCouette—A high-performance code for direct numerical simulations of turbulent Taylor–Couette flow. *SoftwareX*, 11, 100395.
- LOPEZ, J. M. & MARQUES, F. (2022). Stratified Taylor–Couette flow: nonlinear dynamics. *Journal of Fluid Mechanics*, 930.
- LYNCH, R. E., RICE, J. R. & THOMAS, D. H. (1964). Direct solution of partial difference equations by tensor product methods. *Numerische Mathematik*, 6(1), 185-199.
- MACKINNON, R. J. & JOHNSON, R. W. (1991). Differential-equation-based representation of truncation errors for accurate numerical simulation. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 13(6), 739-757.
- MAIONE, R., DE RICHTER, S. K., MAUVIEL, G. & WILD, G. (2015). DEM investigation of granular flow and binary mixture segregation in a rotating tumbler: Influence of particle shape and internal baffles. *Powder Technology*, 286, 732-739.
- MARTINAND, D., SERRE, E. & LUEPTOW, R. M. (2014). Mechanisms for the transition to waviness for Taylor vortices. *Physics of Fluids*, 26(9).
- MELETTI, G., ABIDE, S., VIAZZO, S., KREBS, A. & HARLANDER, U. (2021). Experiments and long-term high-performance computations on amplitude modulations of strato-rotational flows. *Geophysical & Astrophysical Fluid Dynamics*, 115(3), 297-321.
- MOREAU, J. J. (1988). Unilateral contact and dry friction in finite freedom dynamics, 1-82.
- MOREAU, J. J. (1994). Some numerical methods in multibody dynamics: application to granular materials. *European Journal of Mechanics-A/Solids*, 13(4-suppl), 93-114.
- MOREAU, J. J. (1999). Numerical aspects of the sweeping process. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 177(3-4), 329-349.
- MUSSER, J., ALMGREN, A. S., FULLMER, W. D., ANTEPARA, O., BELL, J. B., BLASCHKE, J., GOTTF, K., MYERS, A., PORCU, R., RANGARAJAN, D. et al. (2022). MFIX-Exa: A path toward exascale CFD-DEM simulations. *The International Journal of High Performance Computing Applications*, 36(1), 40-58.
- NARIMANYAN, A. (2009). Unilateral conditions modelling the cut front during plasma cutting: FEM solution. *Applied mathematical modelling*, 33(1), 176-197.
- NG, C. S., CHUNG, D. & OOI, A. (2013). Turbulent natural convection scaling in a vertical channel. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 44, 554-562.
- NICOUUD, F. (2000). Conservative High-Order Finite-Difference Schemes for Low-Mach Number Flows. *Journal of Computational Physics*, 158(1), 71-97.
- NIELSEN, P. V., RESTIVO, A. & WHITELAW, J. H. (1978). The Velocity Characteristics of Ventilated Rooms. *Journal of Fluids Engineering*, 100(3), 291-298.
- NIELSEN, P. V., RESTIVO, A. & WHITELAW, J. H. (1979). Buoyancy-affected flows in ventilated rooms. *Numerical Heat Transfer*, 2(1), 127-1979.
- OGUIC, R., VIAZZO, S. & PONCET, S. (2015). A parallelized multidomain compact solver for incompressible turbulent flows in cylindrical geometries. *Journal of Computational Physics*, 300, 710-731.
- O'NEIL, E. J. (1969). The stability of flows in a differentially heated rotating fluid system with rigid bottom and free top. *Studies in Applied Mathematics*, 48(3), 227-256.
- ORSZAG, S. A. & PATTERSON, G. S. (1972). Numerical simulation of three-dimensional homogeneous isotropic turbulence. *Physical Review Letters*, 28(2), 76-79.
- PALLARES, J., VERNET, A., FERRE, J. A. & GRAU, F. X. (2010). Turbulent large-scale structures in natural convection vertical channel flow. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 53(19-20), 4168-4175.

- PATERA, A. T. (1984). A spectral element method for fluid dynamics: Laminar flow in a channel expansion. *Journal of Computational Physics*, 54(3), 468-488
- ELEMENTS SPECTRAUX.
- PAULICK, M., MORGENEYER, M. & KWADE, A. (2015). Review on the influence of elastic particle properties on DEM simulation results. *Powder Technology*, 283, 66-76.
- PEKUROVSKY, D. (2012). P3DFFT: A Framework for Parallel Computations of Fourier Transforms in Three Dimensions. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 34(4), C192-C209.
- PEYRET, R. & TAYLOR, T. D. (1983). *Computational Methods for Fluid Flow* (T. 39). Berlin, Heidelberg, Springer Berlin Heidelberg.
- PIERREHUMBERT, R. & SWANSON, K. (1995). Baroclinic instability. *Annual review of fluid mechanics*, 27(1), 419-467.
- PIROZZOLI, S. (2002). Conservative hybrid compact-WENO schemes for shock-turbulence interaction. *Journal of Computational Physics*, 178(1), 81-117.
- POLIZZI, E. & SAMEH, A. (2007). SPIKE: A parallel environment for solving banded linear systems. *Computers & Fluids*, 36, 113-120.
- RASPO, I., OUAZZANI, J. & PEYRET, R. (1996). A spectral multidomain technique for the computation of the Czochralski melt configuration. *International Journal of Numerical Methods for Heat and Fluid Flow*, 6(1), 31-58.
- RODDA, C. (2019). *Gravity wave emission from jet systems in the differentially heated rotating annulus experiment*. (thèse de doct.). Brandenburgische Technische Universität Cottbus (Allemagne).
- RODDA, C., HIEN, S., ACHATZ, U. & HARLANDER, U. (2020). A new atmospheric-like differentially heated rotating annulus configuration to study gravity wave emission from jets and fronts. *Experiments in Fluids*, 61(1), 1-20.
- ROUX, B., GRONDIN, J. C., BONTOUX, P. & GILLY, B. (1978). ON A HIGH-ORDER ACCURATE METHOD FOR THE NUMERICAL STUDY OF NATURAL CONVECTION IN A VERTICAL SQUARE CAVITY. *Numerical Heat Transfer*, 1(3), 331-349.
- SABEUR, B. M., STÉPHANE, A., BELKACEM, Z. & HÉDI, H. (2017). Numerical study of Transfer by convection in a lid-driven cavity with a thin PCM layer. *Energy Procedia*, 139, 505-510.
- SAKAMOTO, Y. & MATSUO, Y. (1980). Numerical predictions of three-dimensional flow in a ventilated room using turbulence models. *Applied Mathematical Modelling*, 4(1), 67-72.
- SCHIESTEL, R. & VIAZZO, S. (1995). A hermitian-fourier numerical method for solving the incompressible navier-stokes equations. *Computers and Fluids*, 24(6), 739-752.
- SENGUPTA, T. K., DIPANKAR, A. & RAO, A. K. (2007). A new compact scheme for parallel computing using domain decomposition. *Journal of Computational Physics*, 220(2), 654-677.
- SERRE, E. & PULICANI, J. P. (2001). A three-dimensional pseudospectral method for rotating flows in a cylinder. *Computers and Fluids*, 30(4), 491-519.
- SHALYBKOV, D. & RÜDIGER, G. (2005). Stability of density-stratified viscous Taylor-Couette flows. *Astronomy & Astrophysics*, 438(2), 411-417.
- SIGNORINI, A. (1933). Sopra alcune questioni di statica dei sistemi continui. *Annali della Scuola Normale Superiore di Pisa-Classe di Scienze*, 2(2), 231-251.
- SPOTZ, W. F. & CAREY, G. F. (1994). *High-Order Compact Finite Difference Methods with Applications to Viscous Flows* (rapp. tech.).
- SPOTZ, W. F. & CAREY, G. F. (1995). High-Order Compact Scheme for the Steady Stream-Function Vorticity Equations. *International Journal for Numerical ...*, 38(1995), 3497-3515.
- SUN, X. H. (1995). Application and accuracy of the parallel diagonal dominant algorithm. *Parallel Computing*, 21(8), 1241-1267.
- TAM, C. K. & WEBB, J. C. (1993). Dispersion-Relation-Preserving Finite Difference Schemes for Computational Acoustics. *Journal of Computational Physics*, 107(2), 262-281.
- TARZIA, D. (1996). A steady-state two-phase Stefan-Signorini problem with mixed boundary data. *NiSt96*, 35-42.

- TERZI, A., FOUDHIL, W., HARMAND, S. & BEN JABRALLAH, S. (2016). Liquid film evaporation inside an inclined channel: Effect of the presence of a porous layer. *International Journal of Thermal Sciences*, 109, 136-147.
- TOVONDRAINY, N., ABIDE, S., ZEGHMATI, B., RAMINOSOA, C. & RANDRIAZANAMPARANY, M. (2017). Numerical study of heat transfer and flow characteristics of air jet in a semi-confined cavity, In *Energy Procedia*.
- TSUJI, Y., KAWAGUCHI, T. & TANAKA, T. (1993). Discrete particle simulation of two-dimensional fluidized bed. *Powder technology*, 77(1), 79-87.
- TYLISZCZAK, A. (2016). High-order compact difference algorithm on half-staggered meshes for low Mach number flows. *Computers and Fluids*, 127, 131-145.
- VEDY, E., VIAZZO, S. & SCHIESTEL, R. (2003). A high-order finite difference method for incompressible fluid turbulence simulations. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 42(11), 1155-1188.
- VERSTEEGH, T. & NIEUWSTADT, F. (1998). Turbulent budgets of natural convection in an infinite, differentially heated, vertical channel. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 19(2), 135-149.
- VIAZZO, S., PONCET, S., SERRE, E., RANDRIAMAMPIANINA, A. & BONTOUX, P. (2011). High-order Large Eddy Simulations of Confined Rotor-Stator Flows. *Flow, Turbulence and Combustion*, 88(1-2), 63-75.
- VISBAL, M. R. & GAITONDE, D. V. (2002). On the use of higher-order finite-difference schemes on curvilinear and deforming meshes. *Journal of Computational Physics*, 181(1), 155-185.
- VOLLER, V. & CROSS, M. (1981). Accurate solutions of moving boundary problems using the enthalpy method. *International journal of heat and mass transfer*, 24(3), 545-556.
- WILSON, R. V., DEMUREN, A. O., CARPENTER, M. & ROBERT V. WILSON, A. O. D. (2001). Higher-Order Compact Schemes for Numerical Simulation of Incompressible Flows. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 39(3), 231-255.
- WRIGHT, S., SU, S., SCOLAN, H., YOUNG, R. & READ, P. L. (2017). Regimes of axisymmetric flow and scaling laws in a rotating annulus with local convective forcing. *Fluids*, 2(3), 41.
- YEUNG, P. K. & RAVIKUMAR, K. (2020). Advancing understanding of turbulence through extreme-scale computation: Intermittency and simulations at large problem sizes. *Physical Review Fluids*, 5(11), 110517.
- ZHANG, J., GE, L. & KOUATCHOU, J. (2000). A two colorable fourth-order compact difference scheme and parallel iterative solution of the 3D convection diffusion equation. *Mathematics and Computers in Simulation*, 54(1-3), 65-80.
- ZHANG, J., KOUATCHOU, J. & GE, L. (2002). A family of fourth-order difference schemes on rotated grid for two-dimensional convection – diffusion equation. *Mathematics and Computers in Simulation*, 59, 413-429.
- ZHANG, S. & ZHU, J. (2013). A projection iterative algorithm boundary element method for the Signorini problem. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 37(1), 176-181.
- ZHANG, W. & CHEN, Q. (2000). Large eddy simulation of indoor airflow with a filtered dynamic subgrid scale model. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 43(17), 3219-3231.
- ZHANG, Z., ZHANG, W., ZHAI, Z. J. & CHEN, Q. Y. (2007). Evaluation of various turbulence models in predicting airflow and turbulence in enclosed environments by CFD: Part 2—comparison with experimental data from literature. *HVAC and R Research*, 13(6), 871-886.
- ŽNIDARČIČ, A. & COUTIER-DELGOSHA, O. (2019). New algorithm for fast DNS simulations of cavitating flows using homogeneous mixture approach. *Open Archives of the 16th International Symposium on Transport Phenomena and Dynamics of Rotating Machinery, ISROMAC 2016*.

I. Liste des publications et communications

1.a Articles dans des revues indexées par scopus.

- [ACL 21] Abide, S., Barboteu, M., **Cherkaoui, S.**, & Dumont, S. (2021). A semi-smooth Newton and Primal–Dual Active Set method for Non-Smooth Contact Dynamics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 387, 114153.
- [ACL 20] Abide, S., Barboteu, M., **Cherkaoui, S.**, Danan, D., & Dumont, S. (2021). Inexact primal–dual active set method for solving elastodynamic frictional contact problems. *Computers & Mathematics with Applications*, 82, 36-59.
- [ACL 19] Abide, S. (2020). Finite Difference preconditioning for compact scheme discretizations of the Poisson equation with variable coefficients. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 379, 112872.
- [ACL 18] Abide, S., **Mansouri, W.**, **Cherkaoui, S.**, & Cheng, X. (2020). High-order compact scheme finite difference discretization for Signorini's problem. *International Journal of Computer Mathematics*, 1-12.
- [ACL 17] **Meletti, G.**, Abide, S., Viazzo, S., Krebs, A., & Harlander, U. (2020). Experiments and long-term high-performance computations on amplitude modulations of strato-rotational flows. *Geophysical & Astrophysical Fluid Dynamics*, 1-25.
- [ACL 16] Ran, Q., Cheng, X., & Abide, S. (2020). A Dynamical Method for Solving the Obstacle Problem. *Numerical Mathematics: Theory, Methods & Applications*, 13(2)
- [ACL 15] Abide, S., Viazzo, S., Raspo, I., & Randriamampianina, A. (2018). Higher-order compact scheme for high-performance computing of stratified rotating flows. *Computers & Fluids*, 174, 300-310.
- [ACL 14] **Derouich, Y.**, Nasri, Z., Abide, S., & Laatar, A. H. (2018). Inclination effects on heat transfer by an oscillating square cylinder in channel flow. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 125, 1105-1120.
- [ACL 13] **Doukkali, H.**, Abide, S., Lhassane Lahlaouti, M., & Khamlich, A. (2018). Large Eddy Simulation of turbulent natural convection in an inclined tall cavity. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, 74(4), 1175-1189.
- [ACL 12] **Kherbache, K.**, Chesneau, X., Zeghmati, B., Abide, S., & Benmamar, S. (2017). The effects of step inclination and air injection on the water flow in a stepped spillway: A numerical study. *Journal of Hydrodynamics*, 29(2), 322-331.
- [ACL 11] Abide, S., & Zeghmati, B. (2017). Multigrid defect correction and fourth-order compact scheme for Poisson's equation. *Computers & Mathematics with Applications*, 73(7), 1433-1444.
- [ACL 10] **Chabani, O.**, Abide, S., Lamrous, N., & Zeghmati, B. (2017). Numerical study of non-Boussinesq convection in a ventilated cavity. *Computational Thermal Sciences: An International Journal*, 9(2).
- [ACL 9] Abide, S., **Binous, M. S.**, & Zeghmati, B. (2017). An efficient parallel high-order compact scheme for the 3D incompressible Navier–Stokes equations. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, 31(4-5), 214-229.
- [ACL 8] **Binous , M. S.**, Abide, S., Belkacem, Z., & Hédi, H. (2017). Numerical study of Transfer by convection in a lid-driven cavity with a thin PCM layer. *Energy Procedia*, 139, 505-510.
- [ACL 7] **Tovondrainy, N.**, Abide, S., Zeghmati, B., Raminosoa, C., & Randriazanamparany, M. A. (2017). Numerical study of heat transfer and flow characteristics of air jet in a semi-confined cavity. *Energy Procedia*, 139, 682-688.
- [ACL 6] Abide, S., Barboteu, M., & **Danan, D.** (2016). Analysis of two active set type methods to solve unilateral contact problems. *Applied Mathematics and Computation*, 284, 286-307.
- [ACL 5] Van Cong, H., Abide, S., Zeghmati, B., & Chesneau, X. (2014). Optical bandgap in various impurity-Si systems from the metal–insulator transition study. *Physica B: Condensed Matter*, 436, 130-139.
- [ACL 4] Abide, S., Chesneau, X., & Zeghmati, B. (2012). A Fourth-Order Iterative Solver for the Singular Poisson Equation. In *International Conference on Numerical Analysis and Its Applications* (pp. 143-150). Springer, Berlin, Heidelberg.
- [ACL 3] Abide, S., Chesneau, X., & Zeghmati, B. (2012). Compact mixed methods for convection/diffusion type problems. *Applied Mathematics and Computation*, 218(10), 5867-5876.
- [ACL 2] Chesneau, X., Abide, S., & Zeghmati, B. (2011). Turbulent Mixed Convection Inside a Vertical Tube With Wetted Wall. *Journal of heat transfer*, 133(10).
- [ACL 1] Abide, S., & Viazzo, S. (2005). A 2D compact fourth-order projection decomposition method. *Journal of Computational Physics*, 206(1), 252-276.

1.b Articles dans des revues non indexées dans une base de données & vulgarisation.

- [B8] Zeghmati, B., & Abide S. (2017). Le séchage solaire. *UPVD Recherche, Hors- Série de l'UPVD* 10.
- [B7] **Binous, M. S.**, Abide, S., Zeghmati, B., & Hedi, H. (2017). 3D Incompressible Turbulent Flow in a Parallelipipedic Cavity. *Machine Dynamics Research*, 40(2).
- [B6] Zeghmati, B., & Abide, S. (2015). L'habitat bio-climatique dans le réchauffement climatique. *UPVD Recherche, Hors-Série de l'UPVD* 6.
- [B5] **Khouya, A.**, Draoui, A., Zeghmati, B., Abide, S., & Chesneau, X. (2014). The Effect of combined convective and microwave heating on mechanical behaviour of wood during drying. *Int J Adv Res Electr Electron InstrumEng*, 3, 8287-8299.

- [B4] **Kherbache, K.**, Chesneau, X., Abide, S., & Benmamar, S. (2013). Modeling of a water flow over stepped spillways. *Machine Dynamics Research*, 37(1), 51-68.
- [B3] Chesneau, X., Zeghamati B., & Abide, S. (2012). Numerical Simulation of Turbulent Heat Transfer in a Vertical Channel with Discrete Heat Wall. *Machine Dynamics Research* 36(1), p. 48-63.
- [B2] Abide, S., Chesneau, X., & Zeghamati, B. (2011). A 4th-Order Staggered Compact Finite Difference Method for the Three-Dimensional Incompressible Navier-Stokes Equations. *Machine Dynamics Research*, 35(1), 7-18.
- [B1] Abide, S., & Caro, F. (2007). Maquette solveur volumes finis multi-physique. *Tech. Report SFME/MTMS/RT/07-005/B*, CEA, DEN/DM2S.

1.c Communications dans des congrès internationaux ou nationaux.

- [C20] Stéphane, Viazza, Stéphane, Abide, Rodica, Borcia, Isabelle, Raspo, Andreas, Krebs, Uwe, Harlander, Anthony, Randriamampianina. "Small-scales riding on the jet front of baroclinic waves in an atmospheric-like differentially heated rotating annulus". In : International *Couette-Taylor Workshop*, online.
- [C19] Stéphane, Abide, Gabriel, Meletti, Raspo, Isabelle, et al. Direct Numerical Simulation of an atmospheric-like differentially heated rotating annulus. In : *EGU General Assembly Conference Abstracts*. 2021. p. EGU21-7003.
- [C18] Gabriel Meletti, Isabelle Raspo, Torsten Seelig, Stéphane Viazza et al. "On the instability of radially sheared and axially stratified vortex flow". In : *European Geosciences Union General Assembly, Vienna-Austria*. 2018.
- [C17] Hanae Doukkali, Stéphane Abide et Robert Brouzet. "Spectral-like discretization and parallel computation for incompressible turbulent flows". In : Emerging Trends in Applied Mathematics et Mechanics, Jagiellonian University in Krakow-Poland. 2018.
- [C16] Stéphane Abide, Stéphane Viazza, Isabelle Raspo, Anthony Randriamampianina et al. "High-Order Compact scheme for High-Performance Computing of stratified rotating flows". In : *20th International Couette Taylor Workshop, Marseille-France, 2018*. 2018.
- [C15] Gabriel Meletti, Harlander Uwe, Seelig Torsten, Stéphane Viazza et al. "Experimental Confirmation of Linear Stability Results on Stratified Taylor-Couette Flows". In : *ICTW20: 20th International Couette Taylor Workshop, Marseille-France*. 2018.
- [C14] Gabriel Meletti, Isabelle Raspo, Torsten Seelig, Stephane Viazza et al. "On the instability of radially sheared and axially stratified vortex flow". In : *European Geosciences Union General Assembly, Vienna-Austria*. 2018.
- [C13] Mohamed Sabeur Binous, Stéphane Abide, Belkacem Zeghamati et Hedy Hassis. "Numerical study of transfer by convection in a lid-driven cavity with a thin PCM layer". In : International Conference On Materials et Energy ICOME, La Rochelle-France. 2016.
- [C12] Mohamed Sabeur Binous, Stéphane Abide, Belkacem Zeghamati et Hedy Hassis. "Numerical study of transfer by convection in a lid-driven cavity with a thin PCM layer". In : International Conference On Materials et Energy ICOME, La Rochelle-France. 2016.
- [C11] Tovondrainy Norbert, Stéphane Abide, Belkacem Zeghamati, Chrysostôme Raminosoa, Michel Aimé Randriazanamparany. "Simulation numérique d'un jet impactant la paroi inférieure d'une cavité semi-ouverte". In : 17èmes Journées Internationales de Thermique, Marseille-France. 2015.
- [C10] Oussama Chabani, Stéphane Abide, Nacer Lamrous et Belkacem Zeghamati. "Simulation numérique de la convection thermosolutale non-Boussinesq dans une cavité carrée". In : 22ème Congrès Français de Mécanique, Lyon-France. 2015.
- [C9] Mohamed Sabeur Binous, Stéphane Abide, Belkacem Zeghamati et Hédi Hassis. "Numerical study of natural convection in square enclosure with PCM wall". In : 3ème Conférence Internationale sur les Energies Renouvelables, Sousse-Tunisie. 2015.
- [C8] Stéphane Abide, Belkacem Zeghamati, Oussama Chabani et Nacer Lamrous. "Simulation numérique de la convection Non-Boussinesq dans une cavité ventilée". In : XII ème Colloque Interuniversitaire Franco-Québécois sur la Thermique des Systèmes, Sherbrooke-Canada. 2015.
- [C7] Stéphane Abide, Xavier Chesneau et Belkacem Zeghamati. "A Fourth-Order Iterative Solver for the Singular Poisson Equation". In : 5th International Conference, NAA 2012, Lozenetz, Bulgaria, June 15-20, 2012.
- [C6] Xavier Chesneau, Stéphane Abide et Belkacem Zeghamati. "Etude numérique de la convection mixte turbulente dans un canal vertical". In : Société Française de Thermique, Perpignan - France. May 2011.
- [C5] Stéphane Abide, Stéphane Viazza et Camille Solliec. "Simulation numérique de la convection naturelle en géométrie bidimensionnelle couplage des transferts thermiques fluide/solide". In : 14èmes Journées Internationales de Thermique, Djerba-Tunisia. Mars 2009.
- [C4] Stéphane Abide, Stéphane Viazza et Camille Solliec. "Simulation numérique du refroidissement d'une plaque plane par un jet plan impactant". In : Société Française de Thermique, Vannes - France, June 2009.
- [C3] Stéphane Abide, Stéphane Viazza et Camille Solliec. "Numerical simulation of a plane impinging jet onto a cubical pedestal". In : Heat Transfer, Fluid Mechanics & Thermodynamics, Cairo, Egypt, 19-22 September.
- [C2] Stéphane Abide, Stéphane Viazza et Camille Solliec. "Une méthode de décomposition de domaine pour les équations de Navier-Stokes incompressibles," in : 16ème Congrès Français de Mécanique. Troyes, France Sept. 2005.
- [C1] Stéphane Abide, Guy Capdeville, "Schéma cweno pour l'aéroacoustique d'un vortex en interaction avec une onde de choc", in: 15ème Congrès Français de Mécanique. Nice, France. Sept. 2003.

1.d Séminaires scientifiques & vulgarisation.

[SEM 6] Stéphane Abide, Parallel computing and compact schemes discretization: the baroclinic instability. Goethe University, Frankfurt-Germany, July 14. 2021.

[SEM 5] Stéphane Abide, Compact Schemes discretization for computational mechanics: an illustration from fluid mechanic and Signorini problems. School of Mathematical sciences, Zhejiang University, Hangzhou-china, June 18. 2019.

[SEM 4] Stéphane Abide, Simulation numérique pour l'aéraulique du bâtiment, journée Université de Sherbrooke / COMUE Montpellier 2017.

[SEM 3] Stéphane Abide, Florian Caro, Eli Laucoin, Développement d'un module numérique simulant les écoulements diphasiques en milieu poreux dans un contexte de calcul haute performance, Séminaire du laboratoire Jacques-Louis Lions, Paris, Janv. 2008.

[SEM 2] Stéphane Abide, Florian Caro, Développement de schémas VF dans un environnement parallèle, étude de scalabilité, GDR Momas, Fréjus, Janv. 2007.

[SEM 1] Stéphane Viazzo, Stéphane Abide et Camille Sollicec, Simulations des Grandes Échelles Turbulentes : application au jet plan en impact sur une surface, Séminaire du L3M, Marseille Juillet 2004.

II. Formation par la recherche

Co-encadrant (50%) Hanae Doukkali (2016-2019), *Dir. M.L. Lahlaouti, A. Khamlich (Univ. Tétouan-Maroc)*, « Modélisation bidimensionnelle de l'évaporation/condensation dans une enceinte de dessalement solaire », soutenue Octobre 2021(soutenance décalée cause COVID).

Co-encadrant (33%) Soufiane Cherkaoui (2018-2021) *Dir. M. Barboteu (UPVD) et S. Dumont (Univ. Montpellier)*, « Calcul numérique haute performance pour la résolution de problèmes multi-contact : application aux milieux granulaires », soutenue Novembre 2021.

Co-encadrant (33%) Gabriel Meletti (2017-2020), *Dir. U. Harlander (Univ. BTU-Allemagne) et S. Viazzo (AMU)*, « Instabilités strato-rotationnelles : calcul intensif et expérience », soutenue Décembre. 2020

Co-encadrant (50%) Mohammed Saber Binous (2014-2017) *Dir. B. Zeghami (UPVD) et H. Hassis (Univ. de Tunis)*, « Simulations numériques d'écoulements anisothermes turbulents : application à la cavité ventilée », soutenue en Octobre 2017.

Co-encadrant (25%) David Danan (2013-2016) *Dir. M. Barboteu (UPVD) et M. Sofonea (UPVD)*, « Modélisation, analyse et simulations numériques de quelques problèmes de contact », soutenue en Juillet 2016.

Co-encadrant (25%) Kadija Kerbhache (2011-2014) *Dir. B. Zeghami (UPVD)*, « Contribution à l'étude d'un écoulement d'eau sur un coursier en marches d'escalier », soutenue en Septembre 2014.

Co-encadrant (50%) Oussama Chabani (2015-2019), *Dir. B. Zeghami (UPVD) et N. Lamrouss (Univ. Tizi-Ouzou-Algérie)*, « Simulation numérique de la convection non-Boussinesq dans une cavité fermée ou ventilée », soutenue en Juillet 2019.

Co-encadrant (50%) Tovondrainy Norbert (2013-2016), *Dir. C. Raminosoa, M.A. Randriazanmparany (Univ. Antsiranana-Madagascar) et B. Zeghami (UPVD)*, « Contribution à l'isolation thermique d'une chambre froide par un jet d'air plan anisotherme », soutenue Sept. 2016.

III. Curriculum Vitae

ABIDE Stéphane

Né le 06/12/1977 à Perpignan

Fonction :

Maître de conférences (CN)

Université de Perpignan Via Domitia

Établissement d'Enseignement :

Institut Universitaire de Technologie - Département Génie Industriel et Maintenance

Unité de Recherche :

Laboratoire de Modélisation Pluridisciplinaire et Simulations - UR UPVD

Cursus universitaire

2002/2005 Doctorat, *Mécanique*, École Centrale Nantes.

2001/2002 Diplôme d'Études Approfondies, *Mécanique des Fluides Numérique*, Centrale Nantes.

1998/2001 Diplôme Ingénieur, *Énergétique Industrielle*, ENSI Poitiers.

1996/1998 DEUG, *Mathématiques, Informatique et Applications aux Sciences*, Poitiers.

Éléments de carrière

Févr. 2008 Maître de conférences, Université de Perpignan Via Domitia.

Sept. 2006 Ingénieur de recherche, CEA-Saclay/CS.

Déc. 2005 Post-Doctorat, GEPEA/Université de Nantes.

Sept. 2002 Doctorat, GEPEA/École de Mines de Nantes, thèse *soutenue en décembre 2005*.

Activités de Recherche -synthèse-

Production scientifique

21 publications référencées scopus + 22 communications.

Encadrement doctoral et scientifique

4 thèses soutenues École doctorale Énergie Environnement (ED305), **1 Post-Doctorat, 12 Stages**
Master 1-2 et élèves ingénieurs.

Collaborations (par publication, financement, encadrement ou organisation)

Univ. de Cottbus (Allemagne), Aix-Marseille/M2P2, Univ. du Zhejiang (Chine),

Univ. de Sherbrooke (Canada), Univ. de Perpignan/PROMES.

Mobilités Financées

Mai 2022 (1s) Tétouan Maroc ERASMUS+ (en cours)

Juin 2019 (1m) Hangzhou Chine (CONMECH)

Activités d'expertise

Examinateur dans 3 jurys de thèse Art et Métiers Lille (2015), Centrale Marseille (2016), Centrale Marseille (2022)

Activité éditoriale dans les journaux : Computers & Fluids, Chinese Journal of Chemical Engineering, European Journal of Mechanics – B/Fluids, Journal of Computational Sciences.

Organisation de manifestations

SFT-2011 (membre du Comité Organisateur),

Séminaire Franco Polonais de Mécanique 2011/2013, CO

Rencontre Sherbrooke COMUE/Montpellier 2017, Responsable d'un atelier.

Séminaire Franco Polonais de Mécanique 2021, Organisateur (60 participants).